

CONTRIBUIÇÃO MAGNETOELÁSTICA PARA AS CONSTANTES
ELÁSTICAS DO TÉRBIO MONOCRISTALINO

MILTON STAROSTA TORIKACHVILI

Tese apresentada ao Instituto de
Física 'Gleb Wataghin' da Univer-
sidade Estadual de Campinas para
obtenção do grau de doutor.

- AGOSTO 1978 -

A meus pais.

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Dr. Daltro Garcia Pinatti pela orientação prestada em toda a minha formação de pós-graduação e pelo esforço hercúleo na tentativa de manter um grupo de baixas temperaturas funcionando;
- Ao Prof. Dr. Paul Leighton Donoho pela sugestão e orientação no assunto específico desta tese;
- Ao Prof. Dr. Billy Michael Kale pela revisão de grande parte deste material;
- Aos colegas Olegário Ferreira, Billy Michael Kale e Sérgio Gama pela cooperação no laboratório e pelas várias discussões;
- Aos técnicos Carlos Pastre Pinelli e Antônio Pastre Pinelli pela manutenção dos equipamentos criogênicos e produção dos líquidos;
- Aos outros colegas do grupo de baixas temperaturas e do Instituto de Física que de várias formas contribuíram para o dia a dia da pesquisa;
- A Martha Silvia S. de Oliveira e Selma Craveiro Gusmão pela confecção dos desenhos;
- A meus pais pelo estímulo constante;
- A FAPESP pela concessão de bolsa.

RESUMO

Nós investigamos o comportamento das constantes elásticas de 2ª ordem do térbio monocristalino, com o estado de magnetização do material, em campos magnéticos de até 73 kOe, entre 4,2 e 300 K, intervalo que inclui 3 tipos de ordem magnética: ferromagnética ($T < 221$ K), antiferromagnética helicoidal ($221 \text{ K} < T < 229 \text{ K}$) e paramagnética ($T > 229 \text{ K}$). As constantes elásticas foram determinadas com técnicas de ultrassom e as curvas de magnetização foram obtidas com magnetômetro de amostra vibrante, na mesma amostra. Nós desenvolvemos um modelo para calcular a dependência das constantes elásticas com a magnetização, em que as interações magnetoelásticas são tratadas até 2ª ordem nas deformações e a energia elástica de 3ª ordem não é desprezada. Nós aplicamos este modelo a região paramagnética e os resultados experimentais observados indicam que este tratamento é adequado. Para analisar qualitativa e quantitativamente os resultados deste modelo, nós desenvolvemos um modelo numérico em que, para evitar o tratamento com um número muito grande de constantes de acoplamento magnetoelástico, fazemos muitas aproximações. Com isso, passamos a buscar uma descrição apenas qualitativa dos resultados observados, no que somos bem sucedidos.

ABSTRACT

We have investigated the behavior of the 2nd order elastic constants of single-crystal terbium, with the state of magnetization of the material, in magnetic fields up to 73 kOe, between 4.2 and 300 K, range that includes 3 kinds of magnetic ordering: ferromagnetic ($T < 221$ K), helical antiferromagnetic ($221 \text{ K} < T < 229 \text{ K}$) and paramagnetic ($T > 229 \text{ K}$). The elastic constants were determined with ultrasonic techniques and the magnetization curves were obtained with a vibrating sample magnetometer, in the same sample. We develop a model to calculate the dependence of the elastic constants on magnetization, in which the magnetoelastic interactions are treated up to 2nd order in the strains and the 3rd order elastic energy is not neglected. We apply this model to the paramagnetic region and the observed experimental results indicate that this treatment is adequate. To analyse qualitative and quantitatively the results of this model, we develop a numerical model in which, to avoid treating a very large number of magnetoelastic coupling constants, we make many approximations. With this, we search for just a qualitative description of the observed results, in which we are successful.

ÍNDICE

	PÁGINA
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	1
I.1 - Fases de Ordem Magnética nas Terras Raras Pesadas	4
I.2 - Anisotropia Magnética	6
I.3 - Magnetoestrição	11
I.4 - Expansão Térmica Anômala	14
I.5 - Constantes Elásticas	14
CAPÍTULO II - A EXPERIÊNCIA	21
II.1 - Magneto Supercondutor e Criostatos	21
II.2 - Controle de Temperatura	24
II.3 - Suportes de Amostra	26
II.4 - O Magnetômetro	32
II.5 - O Sistema de Ultrasom	34
II.6 - Transdutores e Ligação Transdutor-Amostra	41
II.7 - A Amostra	42
II.8 - Procedimento Experimental	43
CAPÍTULO III - A TEORIA	48
III.1- O Sistema Elástico	48
III.2- A Interação de Campo Cristalino e a sua Dependência com as Deformações	51
III.3- A Hamiltoniana do Modelo	60
III.4- Aplicação do Modelo ao Cálculo das Constantes Elásticas	68
CAPÍTULO IV - RESULTADOS EXPERIMENTAIS	85
IV.1 - Comportamento das Constantes Elásticas com Magnetização	85
IV.2 - Comportamento da Atenuação	103
IV.3 - Medidas de Magnetização	106

CAPÍTULO V	- ANÁLISE NUMÉRICA DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS	108
V.1	- O Modelo Numérico	109
V.2	- Computação das Quantidades Termodinâmicas do Modelo	111
V.3	- Determinação dos Parâmetros que Entram na Hamiltoniana de Ordem Zero	117
V.4	- Aplicação do Modelo Numérico ao Comportamento das Constantes Elásticas	122
CAPÍTULO VI	- CONCLUSÕES	144
APÊNDICE A	- MEDIDAS DE CONSTANTES ELÁSTICAS COM ULTRASOM EM REDES HCP	146
APÊNDICE B	- OPERADORES TENSORIAIS ESFÉRICOS IRREDUTÍVEIS DE MOMENTO ANGULAR	149
APÊNDICE C	- RESULTADOS EXPERIMENTAIS	151
APÊNDICE D	- PROGRAMAS DE COMPUTADOR	197
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS-		217

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O térbio (Tb^{65}) é um elemento do grupo dos lantanídeos ($57 \leq Z \leq 71$). Estes elementos são conhecidos como terras raras e são caracterizados pelo preenchimento da camada 4f, o que lhes confere propriedades magnéticas notáveis e um comportamento químico si milar. Eles são relativamente abundantes na natureza, mas o estudo sistemático de suas propriedades só começou há cerca de 20 anos, quando Spedding e colaboradores (Ames Laboratories) conseguiram separar quantidades suficientes de material puro. Posteriormente, Spedding e Legvold obtiveram monocristais e mediram algumas de suas propriedades físicas básicas, como susceptibilidade magnética e propriedades de transporte. Estas amostras foram fornecidas ao grupo liderado por Koehler (Oak Ridge National Laboratory), que determinou as estruturas de ordem magnética destes ele mentos, usando técnicas de difração de neutrons. Desde então ocor reu um interesse crescente no estudo dos elementos de terras ra ras, não apenas pelas suas propriedades surpreendentes, mas pelo interesse no uso tecnológico destas propriedades.

Embora o uso de materiais puros seja pequeno, compostos intermetálicos com terras raras estão encontrando várias aplicações tecnológicas. Algumas ligas do tipo Co_5R (R representa alguma ter ra rara), em especial Co_5Sm , combinam as qualidades de alto valor de magnetização de saturação e forte anisotropia magnética¹. Magnetos permanentes feitos com estes materiais são os de maiores forças coercivas já obtidos.

Filmes finos de Gd, Dy, Ho e Er são bons geradores de ultra som². TbFe_2 mostra uma forte magnetoestrição a temperatura ambien te, e filmes finos deste material, depositados em substratos de quartzo ou rubi, funcionam como transdutores de ultrassom de alta eficiência³. Quando o filme mostra magnetização remanente a tem-

peratura ambiente, o transdutor funciona mesmo na ausência de campo magnético de polarização.

Recentemente foram encontrados vários compostos de terras raras que mostram supercondutividade^{4,5}. A observação desta propriedade em $\text{Ho}_{1,2}\text{Mo}_6\text{S}_8$ abre a perspectiva do uso tecnológica destes materiais, pois estes sulfetos (fases de Chevrel) são os compostos de campos críticos mais elevados entre os supercondutores.

Compostos de terras raras são também os materiais mais promissores para o desenvolvimento de bolhas magnéticas como elementos de memória. Eles devem aliar as características de forte anisotropia uniaxial e baixa remanência, o que é conseguido em alguns compostos⁶.

As terras raras tem forte afinidade química a elementos não metálicos como oxigênio e nitrogênio e são usados como elementos de desoxidação de ferros e aços¹. Elas ainda encontram aplicação na confecção de isolantes magnéticos e materiais luminescentes¹.

Grande parte das propriedades das terras raras puras e de seus compostos, é de origem magnetoelástica, isto é, devido a interação entre os sistemas magnético e elástico. Esta interação é muito maior nestes materiais do que nas outras classes que mostram este tipo de acoplamento. Por exemplo, a magnetoestrição (variação relativa de dimensão: $\Delta\ell/\ell$) em níquel e ferro, com campo magnético de saturação aplicado, é da ordem de 3×10^{-5} , dependendo um pouco da direção em que a variação de comprimento é medida. Nas mesmas condições, Tb e algumas outras terras raras pesadas, mostram valores de magnetoestrição que, em algumas direções chegam a 7×10^{-3} (8). O acoplamento magnetoelástico também contribui para o valor das constantes elásticas, e, nas terras raras pesadas, elas dependem fortemente do estado de magnetização do material⁹. Esta dependência pode também ser acentuada em algumas constantes elásticas dos elementos do grupo do ferro, na temperatura

ambiente, onde eles são ferromagnéticos¹⁰.

Neste trabalho, nós medimos a dependência das constantes elásticas de 2ª ordem do térbio monocristalino* com a magnetização. A motivação principal, é de que esse tipo de experiência permite uma análise detalhada das interações magnetoelásticas, pois a energia elástica de 2ª ordem nas deformações, que é muito pequena para ser considerada nos tratamentos de magnetoestrição, é necessária para descrever o comportamento das constantes elásticas de 2ª ordem. Esta pesquisa faz parte de um programa maior desenvolvido entre o Instituto de Física da Unicamp e o de Rice University (USA). O trabalho está em desenvolvimento em cristais de terras raras puras (Tb, Er, Dy, Ho e Gd) e o interesse principal é na medida da dependência das constantes elásticas, deformações e atenuação de ultrassom, como função da magnetização. Nós assumimos que o entendimento das propriedades magnetoelásticas dos cristais puros, deve ajudar no entendimento das propriedades dos compostos, mais difíceis de interpretar, mas tecnologicamente mais importantes.

A configuração eletrônica do estado fundamental do térbio é $Xe\ 4f^8 5d^1 6s^2$ e como nas outras terras raras, os elétrons 4f são os portadores de momento magnético. Os elétrons das camadas completas 5s e 5p tem funções de onda mais expandidas e blindam parcialmente os efeitos eletrônicos e magnéticos dos elétrons 4f. Os elétrons 5d e 6s² tem funções de onda com diâmetro médio muito maior do que as distâncias interatômicas e, no metal, são cedidos

*Monocristais de Tb, como a maioria das outras terras raras pesadas (Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Lu), cristalizam em estrutura hexagonal compacta. Em todo este trabalho, a descrição cristalográfica é feita em termos dos eixos ortohexagonais $\vec{a}([11\bar{2}0])$, $\vec{b}([1\bar{1}00])$ e $\vec{c}([0001])$. \vec{a} e \vec{b} são eixos do plano basal e \vec{c} é o eixo hexagonal.

para a banda de condução. No sólido, a interação dos elétrons 4f com o campo cristalino é pequena, devido a blindagem parcial. Em particular, o momento angular não é apagado como ocorre nos metais de transição. O acoplamento spin-órbita permanece forte e prevalece o esquema de Russel-Saunders para o acoplamento L-S. Os íons Tb^{3+} são quase livres e formam uma rede hexagonal compacta simples (hcp) com $(c/a)=1,581$, um pouco menor do que o valor ideal de 1,633.

O estado fundamental do íon Tb^{3+} é 7F_6 e está separado do primeiro estado excitado (7F_5) de 0,26 eV ⁽¹¹⁾ (≈ 3000 K), uma energia muito maior do que a da interação spin-órbita e do que as das outras interações possíveis em um sólido. Neste trabalho, estaremos sempre nos referindo ao estado fundamental.

Vamos agora proceder, neste capítulo, a uma resenha sobre o comportamento magnético e magnetoelástico das terras raras pesadas.

I.1 - Fases de Ordem Magnética nas Terras Raras Pesadas -

As fases de ordem magnética típicas são os fenômenos mais notáveis nas terras raras pesadas. Estas fases foram determinadas por difração de neutrons¹² e estão esquematizadas na fig.(I-1). Gd é o elemento de estrutura magnética mais simples, pois a única forma de ordenamento que ele apresenta é a fase ferromagnética, a baixo de $T_C=293$ K. Entre 232 K e T_C , a magnetização espontânea se localiza na direção do eixo c. Abaixo de 232 K, ela é função da temperatura¹³. Tb e Dy mostram formas de ordenamento um pouco mais complexas. Eles são ferromagnéticos até T_C ($T_C(Tb)=221$ K , $T_C(Dy)=85$ K). Nesta fase, a forte anisotropia mantém a magnetização espontânea no plano basal, na direção do eixo b em Tb e do eixo a em Dy. Entre T_C e T_N ($T_N(Tb)=229$ K, $T_N(Dy)=179$ K) eles mostram um ordenamento antiferromagnético helicoidal, onde a magnetização local se mantém no plano basal, mas é rodada de plano para

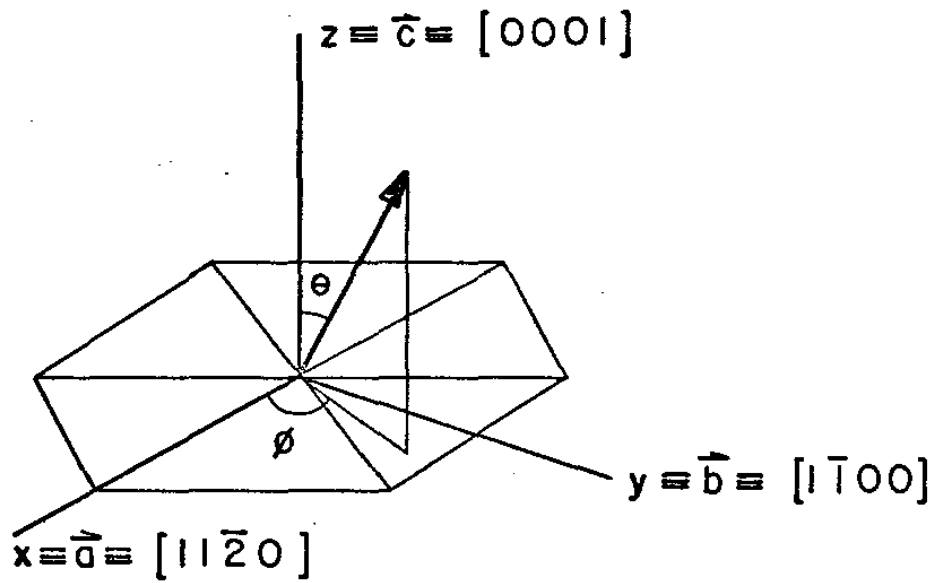
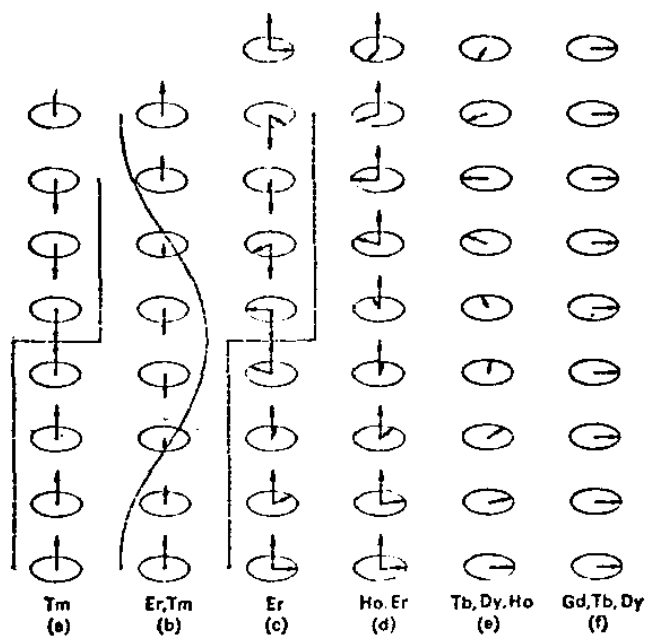


Fig.(I-1) - Ordens Magnéticas nas Terras Raras Pesadas. (Ref. 12)

plano, ao longo do eixo c. O ângulo de giro entre as magnetizações das várias camadas, varia no Tb de 190° /camada próximo a T_C a 200° /camada próximo a T_N , ocorrendo um mínimo de 180° /camada próximo a T_C e um máximo de 210° /camada próximo a T_N ¹⁴. Em Dy, este ângulo varia de $26,50^\circ$ /camada em T_C para $43,20^\circ$ /camada em T_N ¹². Na região antiferromagnética, campos magnéticos da ordem de 1 kOe aplicados no plano basal, são suficientes para induzir a fase ferromagnética no Tb. A estabilidade da fase antiferromagnética do Dy é maior e campos maiores são necessários para induzir o ferromagnetismo, tanto maiores quanto mais próxima de T_N for a temperatura. Ho¹² mostra um ordenamento ferromagnético cônico até $T_C=20$ K, em que a componente c do momento de spin se mantém constante e a componente do plano basal gira de plano para plano. Entre T_C e $T_N=130$ K, ele mostra uma fase antiferromagnética helicoidal similar as de Tb e Dy. Er¹² também é ferromagnético cônico até $T_C=20$ K. Entre T_C e 53 K ele mostra uma região de domínios de antifase, similar a região ferromagnética cônica, mas em que a cada grupo de 4 camadas atômicas, ao longo do eixo c, a componente c do momento de spin troca de sentido. Entre 53 K e $T_N=85$ K, a componente c do momento de spin é modulada senoidalmente com um período de aproximadamente 7 camadas. Atoji¹⁵ mostra que nesta fase há uma pequena componente no plano basal ($\approx 0,4\mu_B$) que gira de plano para plano como na região de domínios de quase antifase. Tm também mostra uma fase com componente c modulada, entre $T_C=32$ K e $T_N=57$ K. Abaixo de T_C a modulação senoidal passa a quadrada. Em Ho, Er e Tm, o ferromagnetismo propriamente dito só ocorre quando induzido por campo magnético. Acima de T_N as terras raras são paramagnetos convencionais, mostrando geralmente um comportamento fortemente anisotrópico na susceptibilidade magnética.

I.2 - Anisotropia Magnética -

A forte anisotropia da susceptibilidade magnética em mono-

cristais de terras raras pesadas é devida principalmente a interação de campo cristalino. Esta é chamada anisotropia de 1 íon e é geralmente muito mais intensa do que a anisotropia da interação de troca, ou de 2 íons. A interação de campo cristalino descreve o acoplamento entre o campo elétrico produzido por todos os átomos do cristal e as nuvens de elétrons das camadas incompletas 4f dos vários íons. Isto estabelece uma direção preferencial na nuvem e faz com que a susceptibilidade magnética seja fortemente anisotrópica. A anisotropia da interação de troca só é relevante em Gd, pois o íon Gd^{3+} está num estado com $\vec{L}=0$, onde a nuvem 4f é esfêricamente simétrica e a anisotropia de 1 íon é nula. A energia de anisotropia magnética apropriada para a simetria hexagonal pode ser escrita na seguinte forma fenomenológica⁸:

$$E_A = K_2^0 Y_2^0(\theta, \phi) + K_4^0 Y_4^0(\theta, \phi) + K_6^0 Y_6^0(\theta, \phi) + K_6^6 Y_{66}^+(\theta, \phi) \quad (I-1)$$

onde θ e ϕ são os ângulos que a magnetização faz com os eixos c e a, respectivamente. $Y_{66}^+(\theta, \phi)$ vale:

$$Y_{66}^+(\theta, \phi) = ((Y_6^6(\theta, \phi) + Y_6^{-6}(\theta, \phi))/2) = \sin^6 \theta \cos 6\phi \quad (I-2)$$

O mínimo da energia de anisotropia determina a direção mais estável para a magnetização espontânea na região ferromagnética, exceto nos casos dos ferromagnetos cônicos, onde a direção é modulada pela interação de troca. Para os 3 primeiros termos da eq.(I-1), $\phi=0$, e eles descrevem uma anisotropia uniaxial, que é dominante. A fig.(I-2a) mostra o comportamento dos harmônicos esféricos como função de θ . Uma vez que a magnetização espontânea do Tb ocorre no plano basal ($\theta=90^\circ$), é claro que o termo em K_2^0 ($K_2^0 > 0$) é o mais importante, pois aí ocorre um mínimo de $Y_2^0(\theta, \phi)$. O fato da magnetização espontânea se estabelecer ao longo do eixo b ($\phi=90^\circ$) indica que $K_6^6(Tb) > 0$, pois os mínimos de Y_{66}^+ correspondem a direção do eixo b ($\phi=30^\circ$ e 90° - fig.(I-2b)). $K_6^6(Dy) < 0$ e a magnetiza

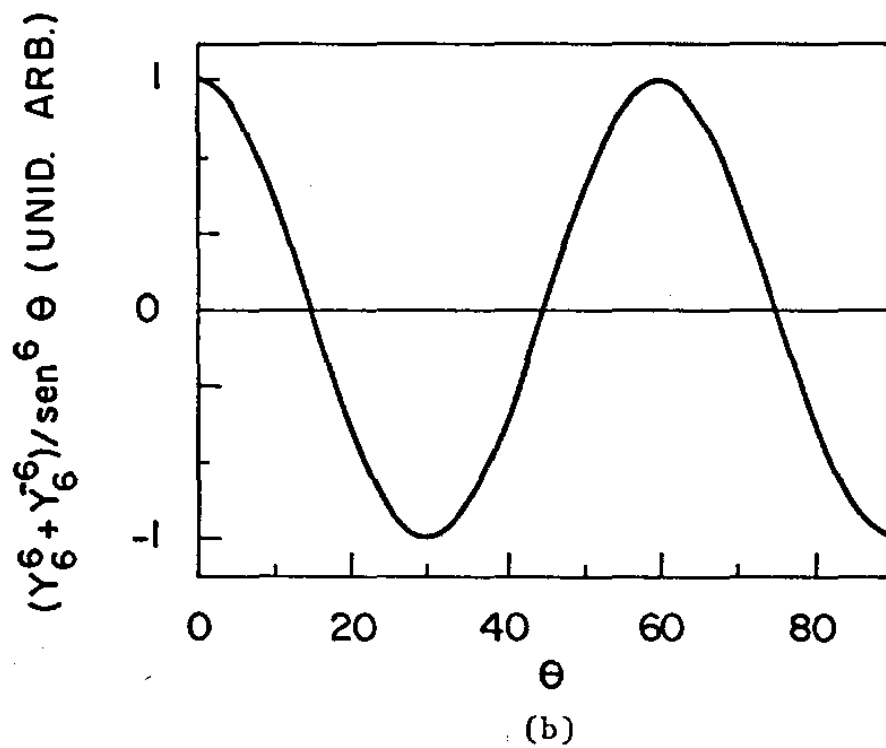
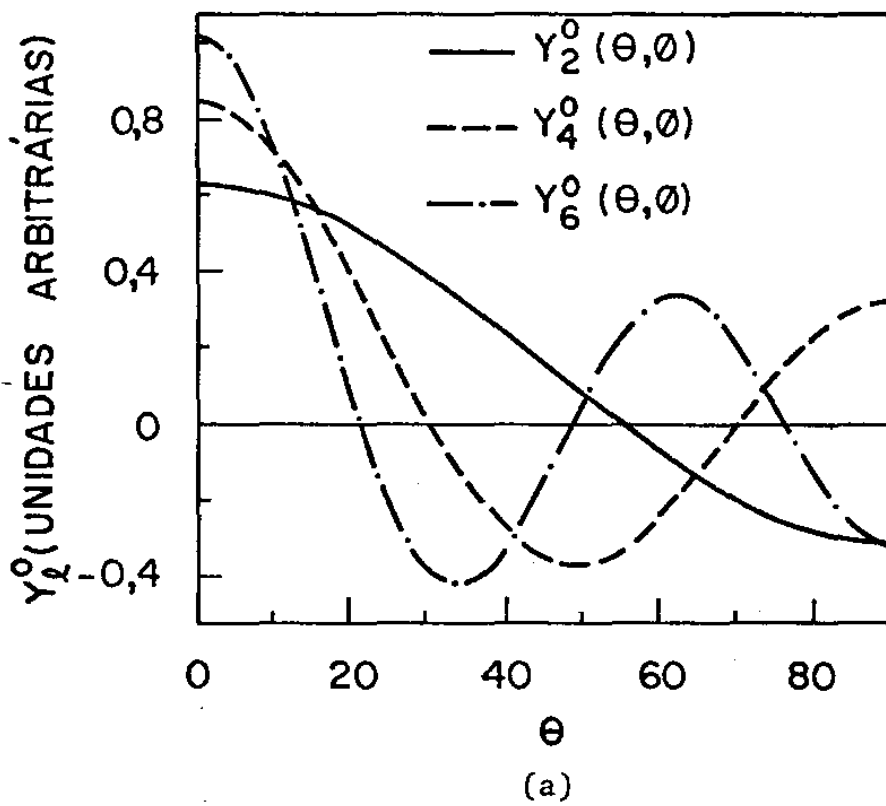


Fig.(I-2) - Dependência Angular dos Harmônicos Esféricos.

ção espontânea se estabelece na direção do eixo a. No Er, a magnetização espontânea se estabelece ao longo do eixo c, e $K_2^0 < 0$.

Callen e Callen^{16,17,18} encontraram a dependência dos K_ℓ^m com a temperatura como sendo:

$$K_\ell^m(T) = K_\ell^m(T=0) \frac{I_{\ell+1/2}[L^{-1}(\sigma)]}{I_{1/2}[L^{-1}(\sigma)]} = K_\ell^m(T=0) \hat{I}_{\ell+1/2}[L^{-1}(\sigma)] \quad (I-3)$$

onde \hat{I} é a função de Bessel hiperbólica reduzida, σ é a magnetização reduzida e $L^{-1}(\sigma)$ é a função de Langevin inversa:

$$L(x) = \coth x - 1/x = \sigma \quad (I-4)$$

$$L^{-1}(\sigma) = x \quad (I-5)$$

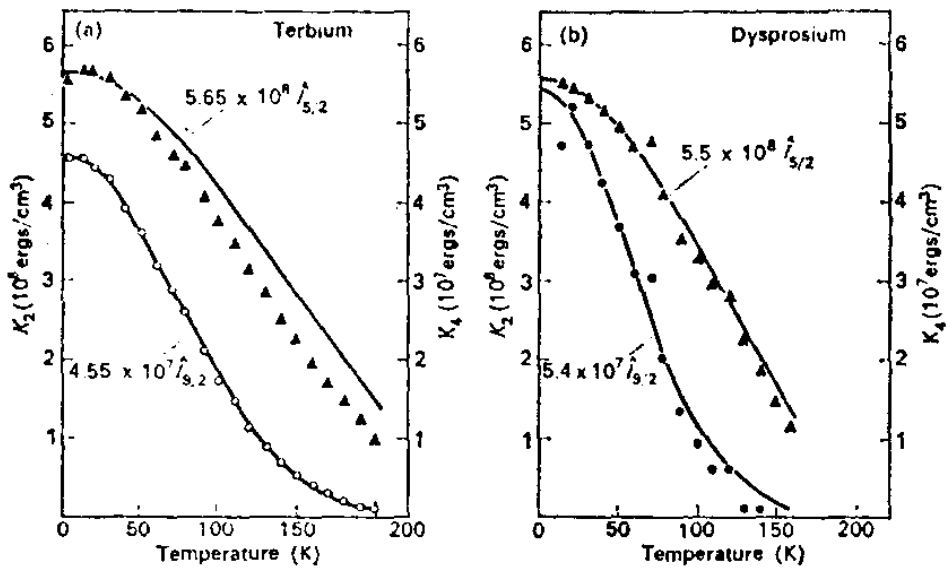
A eq.(I-3) é calculada para $J=\infty$ ⁽¹⁶⁾ e é válida para valores grandes de J, como o do Tb ($J(Tb)=6$). Para $\sigma \approx 1$ (região ordenada), a eq.(I-3) fornece:

$$K_\ell^m(T) \propto \sigma^{\ell(\ell+1)/2} \quad (I-6)$$

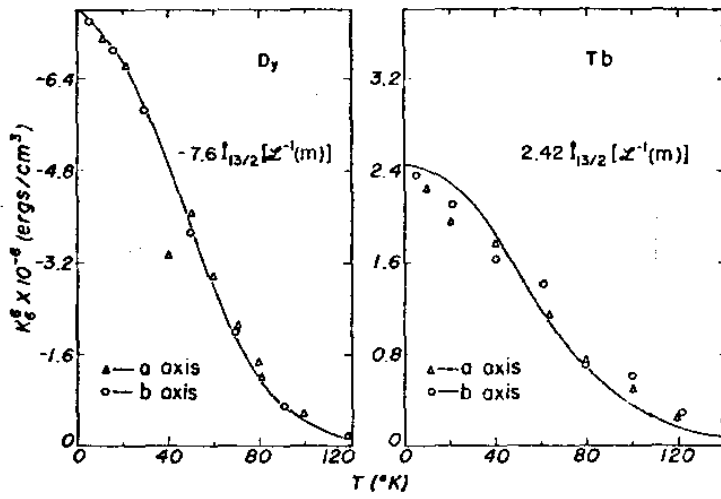
Para $\sigma \ll 1$ ($T > T_C$) a eq.(I-3) indica:

$$K_\ell^m(T) \propto \sigma^\ell \quad (I-7)$$

Rhyn e Clark¹⁹, com técnicas de medida de torque magnético, mediram a dependência de K_2^0 e K_6^6 de Tb e Dy com temperatura. O comportamento observado pode ser ajustado com a eq.(I-3), encontrando-se os valores $K_2^0(11 \text{ K})$ de $5,65 \times 10^8 \text{ erg/cm}^3$ e $5,5 \times 10^8 \text{ erg/cm}^3$ para o Tb e Dy respectivamente. $K_6^6(4,2 \text{ K})$ foi de $2,4 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$ para o Tb e $-7,6 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$ para o Dy. Feron et al.²⁰, usando a mesma técnica, encontraram valores bastante próximos a estes. Eles mediram também $K_4^0(4,2 \text{ K})$, obtendo os valores de $4,55 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$ (Tb) e $-5,4 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$ (Dy). Também o comportamento de $K_4^0(T)$ pode ser ajustado com a teoria de Callen e Callen¹⁶. Estes resultados são mostrados na fig.(I-3). K_2^0 é muito maior do que as



(a)



(b)

Fig.(I-3) - Comportamento Térmico das Constantes de Anisotropia do Têrbio e do Disprósio. ((a) da Ref. 8 e (b) da Ref. 19)

outras constantes de anisotropia em Tb e Dy e isto justifica a observação de que abaixo de 20 K, um campo magnético de 100 kOe aplicado na direção do eixo c destes dois elementos, levanta a direção da magnetização de menos que 10° do plano basal¹⁹.

I.3 - Magnetoestrição -

A magnetoestrição de um material é a variação de suas dimensões devido a interação do sistema magnético com o sistema elástico. Fenomenologicamente, a energia total do sistema magnético pode ser expandida em série de potências das deformações. Geralmente o termo de primeira ordem desta expansão é chamado de energia magnetoelástica e a hamiltoniana correspondente é escrita como⁸:

$$H_{me} = \left(\frac{\partial E_{anis}}{\partial \epsilon} + \frac{\partial E_{tr}}{\partial \epsilon_{ij}} + \frac{\partial E_{Zeeman}}{\partial \epsilon_{ij}} + \dots \right) \epsilon_{ij} \quad (I-8)$$

onde ϵ_{ij} representa o tensor das deformações. Callen e Callen^{21, 22, 23} desenvolveram uma hamiltoniana para o sistema magnetoelástico, baseada na representação de grupo das deformações, incluindo apenas os dois primeiros termos da eq.(I-8). Para cristais com simetria hexagonal, eles obtêm:

$$H_{me} = - \sum_{\mu, j, \ell} B_j^{\mu\ell} \sum_i \epsilon_i^{\mu j} \sum_f K_i^{\mu\ell}(S_f) - \sum_{\mu, j} \sum_{\ell, i} \epsilon_i^{\mu j} \sum_{f, g} D_j^{\mu\ell}(f, g) K_i^{\mu\ell}(S_f, S_g) \quad (I-9)$$

onde os $B_j^{\mu\ell}$ e os $D_j^{\mu\ell}$ são as constantes magnetoelásticas de 1 e 2 íons, respectivamente, e os $\epsilon_i^{\mu j}$ são as deformações irreduzíveis do sistema hexagonal, formadas por combinações das deformações cartesianas*. $K_i^{\mu\ell}(S_f)$ e $K_i^{\mu\ell}(S_f, S_g)$ são funções de base dos operadores de spin de 1 e 2 íons, respectivamente, e são polinômios de ordem ℓ nos spins. Em cristais com centro de simetria, ℓ só pode ser par, e como para elétrons 4f, $\ell \leq 6$, ℓ só pode assumir os valores 0, 2, 4 e 6. As funções de base das representações são indexadas por i ; μ e j indexam as representações irreduzíveis do grupo

*Detalhes no capítulo III.

cristalino; f e g indicam os íons. Só é permitido o acoplamento entre funções de base da mesma representação e com o mesmo índice nas representações multidimensionais.

As magnetoestrições de equilíbrio podem ser determinadas pela minimização da energia magnetoelástica relativamente as deformações. Isto é feito por Clark et al.²⁴, usando apenas termos até $\ell=2$. A expressão encontrada para $\Delta\ell/\ell$, variação relativa das dimensões lineares, foi:

$$\begin{aligned} \Delta\ell/\ell = \lambda = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} \beta_i \beta_j = & [\lambda_1^{\alpha,0} + \lambda_1^{\alpha,2}(\alpha_z^2 - 1/3)](\beta_x^2 \beta_y^2) \\ & + [\lambda_2^{\alpha,0} + \lambda_2^{\alpha,2}(\alpha_z^2 - 1/3)] \beta_z^2 + 2\lambda^{\epsilon,2}(\alpha_x \beta_x + \alpha_y \beta_y) \alpha_z \beta_z \\ & + (1/2)\lambda^{\gamma,2}[(\alpha_x \beta_x + \alpha_y \beta_y)^2 - (\alpha_x \beta_y - \alpha_y \beta_x)^2] \end{aligned} \quad (I-10)$$

α_x , α_y e α_z são os cossenos diretores da magnetização e β_x , β_y e β_z são os da direção de medida. As 6 constantes de magnetoestrição $\lambda_i^{\mu,\ell}$ estão relacionadas com as constantes magnetoelásticas de 1 e 2 íons, e podem ser determinadas experimentalmente. $\lambda_1^{\alpha,0}$ e $\lambda_2^{\alpha,0}$ são termos simétricos e contêm apenas constantes magnetoelásticas de 2 íons. Eles são responsáveis pela expansão térmica anômala que ocorre nas terras raras quando a temperatura decresce de T_N . $\lambda_1^{\alpha,2}$ e $\lambda_2^{\alpha,2}$ representam distorções que preservam a simetria e que alteram as dimensões do plano basal ou do eixo c, respectivamente. $\lambda^{\gamma,2}$ representa uma distorção no plano basal e $\lambda^{\epsilon,2}$ uma distorção em um plano que contém o eixo c. Estes modos são mostrados na fig.(I-4). Callen e Callen¹⁸ obtiveram uma expressão para a dependência das constantes de magnetoestrição de 1 íon com temperatura, que tem a mesma forma da dependência das constantes de anisotropia:

$$\lambda_i^{\mu,\ell}(T) = \lambda_i^{\mu,\ell}(T=0) \hat{I}_{\ell+1/2}[L^{-1}(\sigma)] \quad (I-11)$$

Esta expressão é consistente com os resultados experimentais de

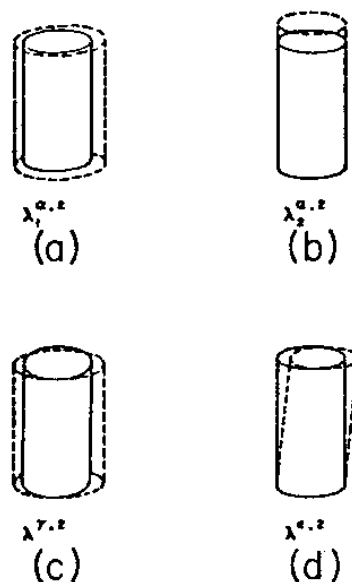


Fig.(I-4) - Modos de Deformações Magnetoestrutivas da Rede Hexagonal, Para $\ell=2$. (Ref. 24)

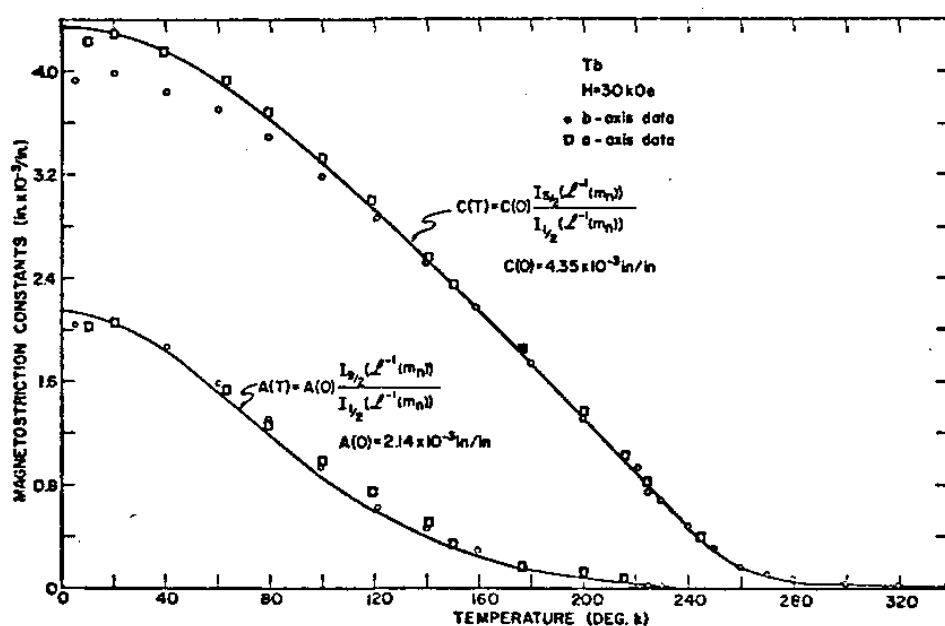


Fig.(I-5) - Comportamento Térmico das Constantes de Magnetoestrição do Têrbio, de Graus 2 e 4, Para H=30 kOe. (Ref. 29)

Clark et al.²⁴ para o Dy e de Rhyne e Legvold²⁵ para o Tb. A fig.(I-5) reproduz o comportamento das constantes de magnetoestrição do Tb²⁵ (C e A representam os termos de grau 2 e 4 nos operadores de spin, respectivamente).

I.4 - Expansão Térmica Anômala -

A dependência dos parâmetros de rede com temperatura, em monocristais de Tb, Dy, Gd, Er e Ho, foi medida por Darnell^{26,27}, usando técnicas de raio-X, que encontrou um comportamento anômalo destes parâmetros nas regiões de ordem magnética. Isto foi atribuído a magnetoestrição e a contribuição principal tem origem na interação de troca que se estabelece abaixo de T_N (ou T_C para o Gd). Em geral, o volume da cela unitária e o parâmetro c crescem com o decréscimo da temperatura, abaixo de T_C ou T_N . Valores muito próximos aos de Darnell foram obtidos com técnicas de extensometria*(Tb²⁵, Dy⁸, Gd²⁸, Er²⁹, Ho³⁰). A fig.(I-6) mostra o comportamento das deformações com e sem campo magnético aplicado, em Tb e Dy, medidas por extensometria^{8,25}.

I.5 - Constantes Elásticas -

Há cinco constantes elásticas independentes em redes hcp e elas podem ser medidas de várias formas (apêndice A). Mas a presença de interações magnetoelásticas pode alterar este número, isto é, constantes elásticas medidas de diferentes maneiras podem resultar diferentes, e isto ocorre nas terras raras.

Embora a dependência das constantes elásticas com temperatura e magnetização seja mais intensa nas terras raras do que em outros materiais, as alterações devidas a estes parâmetros só podem ser detectadas com técnicas de ultrassom. O primeiro estudo experimental sobre o comportamento das constantes elásticas do térbio

*Esta técnica não é aplicável as regiões de ordem magnética a campo magnético nulo, pois a presença de domínios, altera a validade da medida.

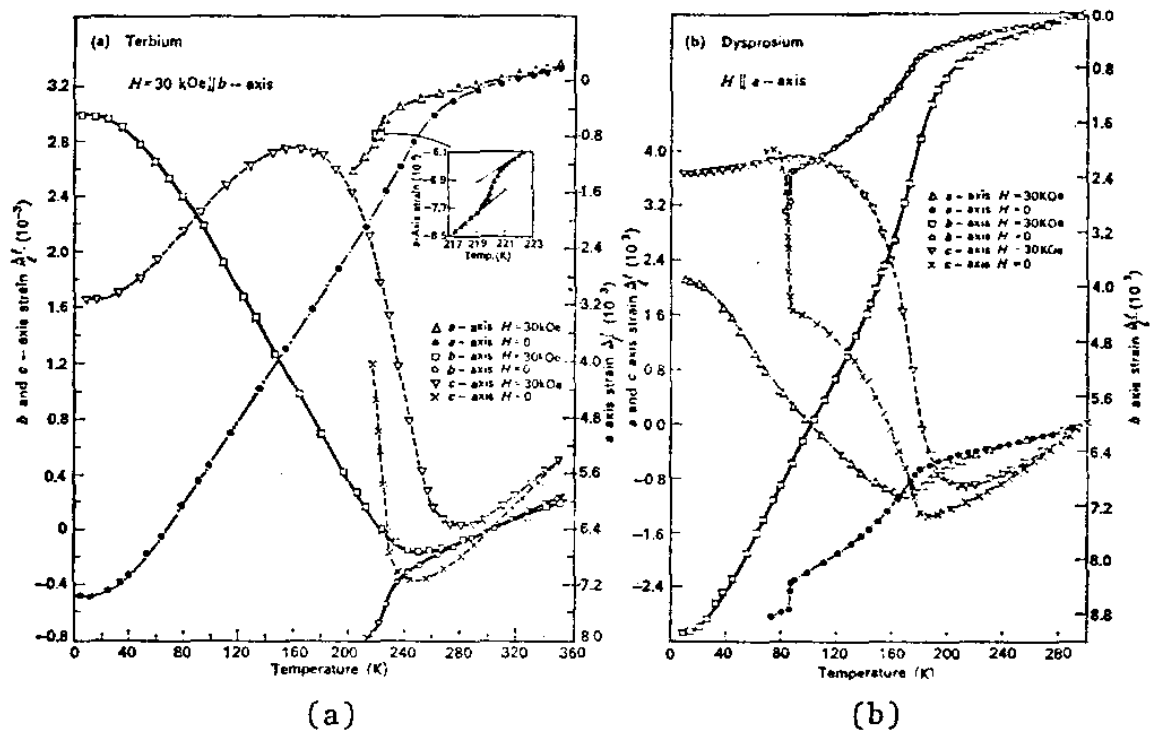


Fig.(I-6) - Comportamento Térmico das Deformações do Tb (a) e do Dy (b) a Campo Magnético Nulo e com Campo de 30 kOe Aplicado no Plano Basal. ((a) da Ref. 25 e (b) da Ref. 29)

monocristalino com a temperatura, foi feito por Salama et al.³¹ que determinaram o comportamento de C_{11} , C_{33} , C_{12} , C_{13} e C_{66} , entre 78 K e 300 K (fig.(I-7)). Salama et al.³² determinaram também o comportamento das constantes elásticas longitudinais C_{11} e C_{33} em campos magnéticos de até 18 kOe, na região paramagnética (fig.(I-8)). Recentemente, Palmer³³ mediu o comportamento de C_{11} com campo magnético baixo aplicado, na região ferromagnética, onde a atenuação é muito forte, usando depósito de CdS como transdutor ultrasônico. A literatura mostra alguns resultados experimentais sobre o comportamento das constantes elásticas de monocristais de Gd³⁴, a campo nulo, Er³⁵, a campo nulo, Ho³⁶, a campo baixo, e também alguns resultados a campo magnético alto sobre Ho, Dy e Tb⁹. Gama³⁷ e Kale³⁸ investigam, respectivamente, as constantes elásticas do Ho a campo baixo e do Dy a campo alto.

Concentrando no Tb, que é o objeto deste trabalho, podemos observar que próximo a T_C e a T_N , as constantes elásticas sofrem mudanças abruptas (fig.(I-7)), que só podem ser atribuídas ao estabelecimento do acoplamento magnetoelástico. A fig.(I-8) mostra que $\Delta C_{11}/C_{11}$ e $\Delta C_{33}/C_{33}^*$ variam quadraticamente com o campo magnético, até ≈ 20 kOe, na região paramagnética, modificando um pouco o comportamento quando a temperatura se aproxima de T_N . Gama et al.⁹ mostram, e nós o fazemos mais extensivamente neste trabalho, que este comportamento é significativamente alterado em campos mais elevados. A forte atenuação que impede que se meça C_{11} com onda longitudinal abaixo de T_C , diminui com a aplicação de campo no plano basal (observação deste trabalho), permitindo a medição na região ferromagnética.

*No capítulo II nós mostramos a equivalência entre $\Delta C/C$ e $\Delta v/v$, onde v é a velocidade do som. Desprezando a magnetoestrição, $(\Delta C/C) = 2(\Delta v/v)$.

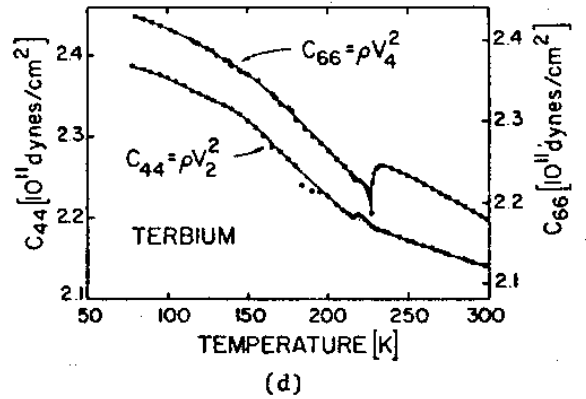
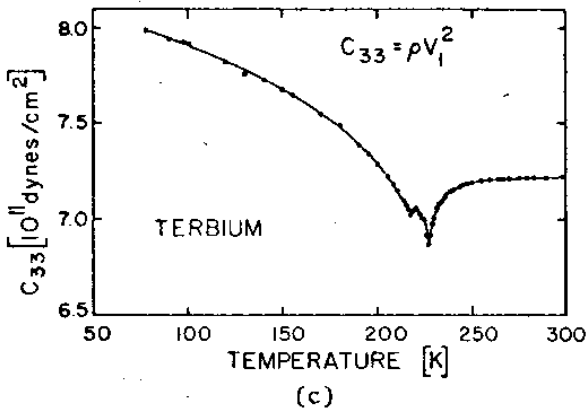
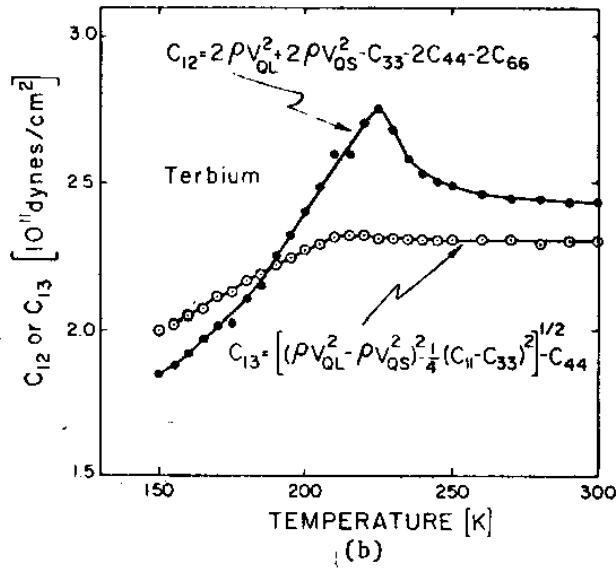
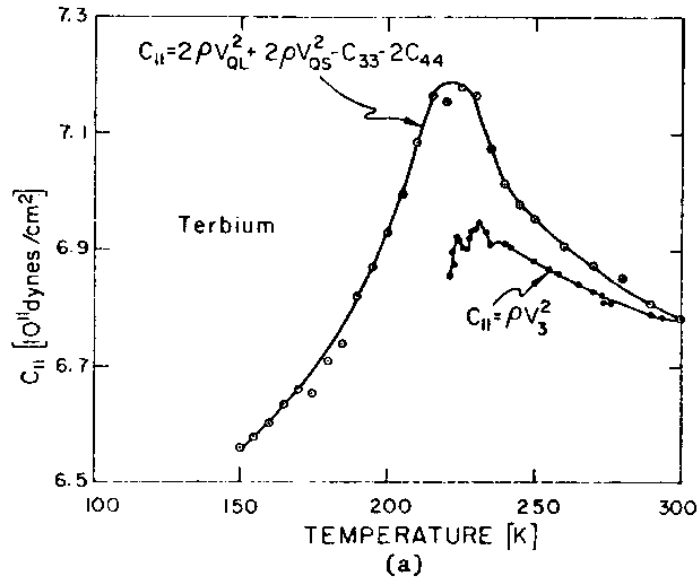


Fig.(I-7) - Comportamento Térmico das Constantes Elásticas C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} e C_{44} do Têrbio. (Ref. 31)

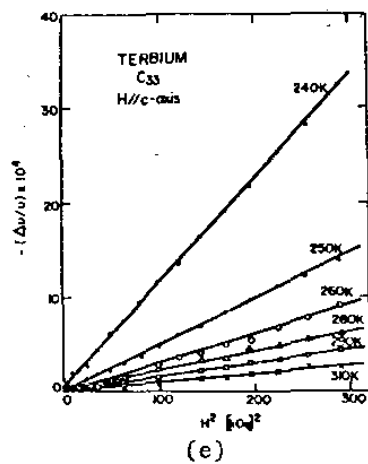
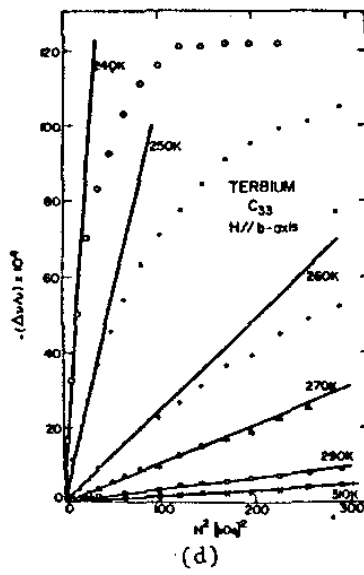
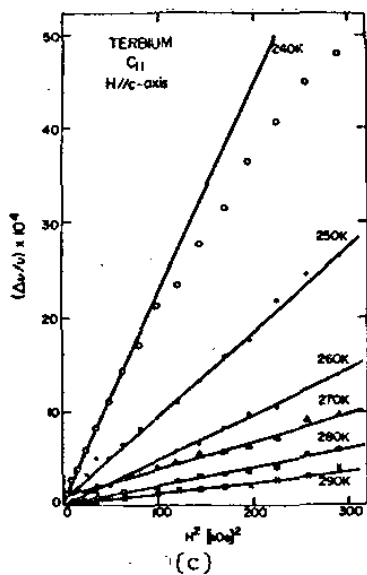
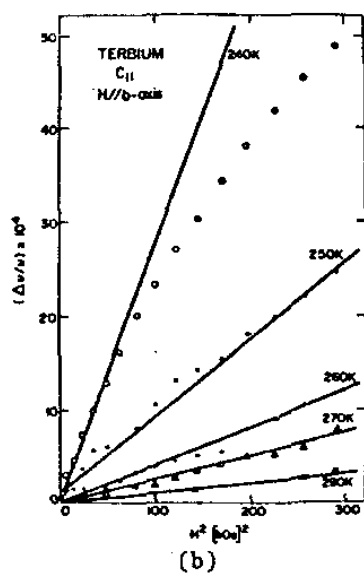
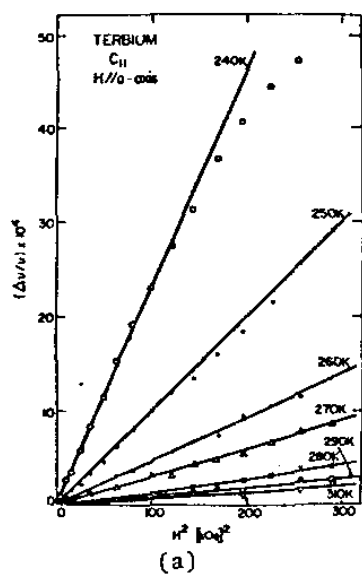


Fig.(I-8) - Comportamento das Constantes elásticas longitudinais com campo magnético, na região paramagnética. (Ref. 32)

Neste trabalho, nós investigamos o comportamento das constantes elásticas $C_{1111}(C_{11})$, $C_{3333}(C_{33})$, $C_{1313}(C_{55})$, $C_{3131}(C_{55})$ e $C_{2121}(C_{66})^*$ com a magnetização, entre 4,2 K e 300 K, em campos magnéticos de até 73 kOe. As constantes elásticas foram medidas com técnicas de ultrassom e as medidas de magnetização foram feitas na mesma amostra, com magnetômetro de amostra vibrante. Também registramos o comportamento da atenuação de ultrassom como função do campo magnético, nas temperaturas em que medimos as constantes elásticas.

Nós mostramos no capítulo de teoria, e também ao analisar os resultados experimentais, a necessidade de que se trate a interação magnetoelástica até 2ª ordem nas deformações. O desprezo a interação magnetoelástica de 2ª ordem nos trabalhos de Callen e Callen e de Southern e Goodings³⁹ dão uma descrição insuficiente para explicar as observações experimentais deste trabalho. Além disso, estes trabalhos negligenciam a energia elástica de 3ª ordem, que pode contribuir para o comportamento observado das constantes elásticas de 2ª ordem com a magnetização. E esta contribuição é efetiva quando calculada usando as constantes elásticas de 3ª ordem calculadas por Rao e Ramanand⁴⁰ para o Tb. O trabalho de Callen e Callen²² é dirigido para o cálculo das deformações de equilíbrio, onde o tratamento da interação magnetoelástica até 1ª ordem nas deformações é justificado. Entretanto, isto não é apropriado para o tratamento do comportamento das constantes elásticas como função da magnetização. É importante ressaltar, que o estudo das constantes elásticas permite um tratamento inequívoco das interações magnetoelásticas, incluindo os termos de ordem superior nas deformações.

Southern e Goodings desenvolveram uma teoria para calcular

*A definição das constantes elásticas de 2ª ordem é feita na seção (III-1) e a forma de medi-las é mostrada no apêndice A.

especificamente a dependência das constantes elásticas das terras raras pesadas com o campo magnético. As previsões desta teoria não são verificadas nos nossos resultados experimentais e nós mostramos, no capítulo de teoria, que o seu tratamento não é adequado, embora a energia elástica possa ser escrita em termos do tensor das deformações finitas. Pela sua teoria, as constantes elásticas longitudinais variariam monotonicamente com a magnetização, na região paramagnética, o que não se verifica no comportamento de C_{3333} do Tb. Também a introdução das parcelas antissimétricas das componentes do tensor das deformações finitas, como termos rotacionais, o que explicaria a não-degenerescência entre as várias formas de medir as constantes elásticas transversais, na região ferromagnética, não dá resultados concordantes com os experimentais. A discordância é tanto qualitativa como quantitativa e a não-degenerescência ocorre também na região ferromagnética. Além disso, a mudança da direção de aplicação do campo, do eixo a para o eixo b, nas medidas de C_{2121} e C_{3131} , que de acordo com sua teoria, modificariam o comportamento de $C_{ijij}(\sigma)$ por fatores do tipo σ^n , com n entre 6 e 42, não se verifica. A diferença devida a mudança da direção do campo realmente ocorre, mas a sua dependência com σ é muito mais intensa do que a prevista.

No capítulo III nós desenvolvemos um tratamento para a contribuição magnetoelástica às constantes elásticas, até 2ª ordem nas deformações e de todas as ordens nos operadores de momento angular ($\ell=2,4,6$). No capítulo IV, nós mostramos os resultados experimentais mais típicos e comparamos-os com as previsões teóricas. No capítulo V, nós analisamos os resultados experimentais, do ponto de vista numérico, desenvolvendo um modelo para calcular algumas das quantidades da teoria e aplicando estes resultados na interpretação do comportamento das constantes elásticas medidas. No capítulo II nós mostramos os detalhes da experiência.

CAPÍTULO II

A EXPERIÊNCIA

O propósito experimental principal deste trabalho foi a obtenção de um conjunto sistemático de medidas da dependência das constantes elásticas de 2ª ordem do térbio monocristalino com a magnetização, entre 4,2 K e 300 K, em campos magnéticos de até 73 kOe. As medidas de magnetização e constantes elásticas foram feitas independentemente na mesma amostra, como função do campo, e relacionadas posteriormente. Com isto foram evitados os erros oriundos em pequenas diferenças de composição entre amostras e na inclusão de um campo de demagnetização não uniforme, próprio de a mostras com formas singulares, como as usadas para medidas de ultrassom.

Neste capítulo nós descrevemos a instrumentação usada e o procedimento experimental na realização dos dois tipos de medida. As curvas de magnetização foram obtidas com magnetômetro de amostra vibrante e as constantes elásticas foram medidas com técnicas de ultrassom. A atenuação do ultrassom também foi medida, como função do campo e da temperatura. O sistema criogênico, mostrado na fig.(II-1), foi essencialmente o mesmo nos dois tipos de medida.

II.1 - Magneto Supercondutor e Criostatos -

O magneto supercondutor (Oxford Instruments Co.) utilizado tem características de alta homogeneidade, fornecendo campos de até 75 kOe, com uma inhomogeneidade de 10^{-5} em uma esfera de 10 mm de diâmetro localizada no seu centro. O enrolamento é feito em fio de NbTi multifilamentar e encapsulado em resina epoxi. O vão livre interno é de 50 mm e a altura total é de 365 mm. A corrente é fornecida por uma fonte de corrente (Oxford) de 60 A, controlada por um gerador eletromecânico de varredura, de velocidade ajustável. A corrente máxima no magneto pode ser limitada na fonte de potência, impedindo que ele receba corrente suficiente para

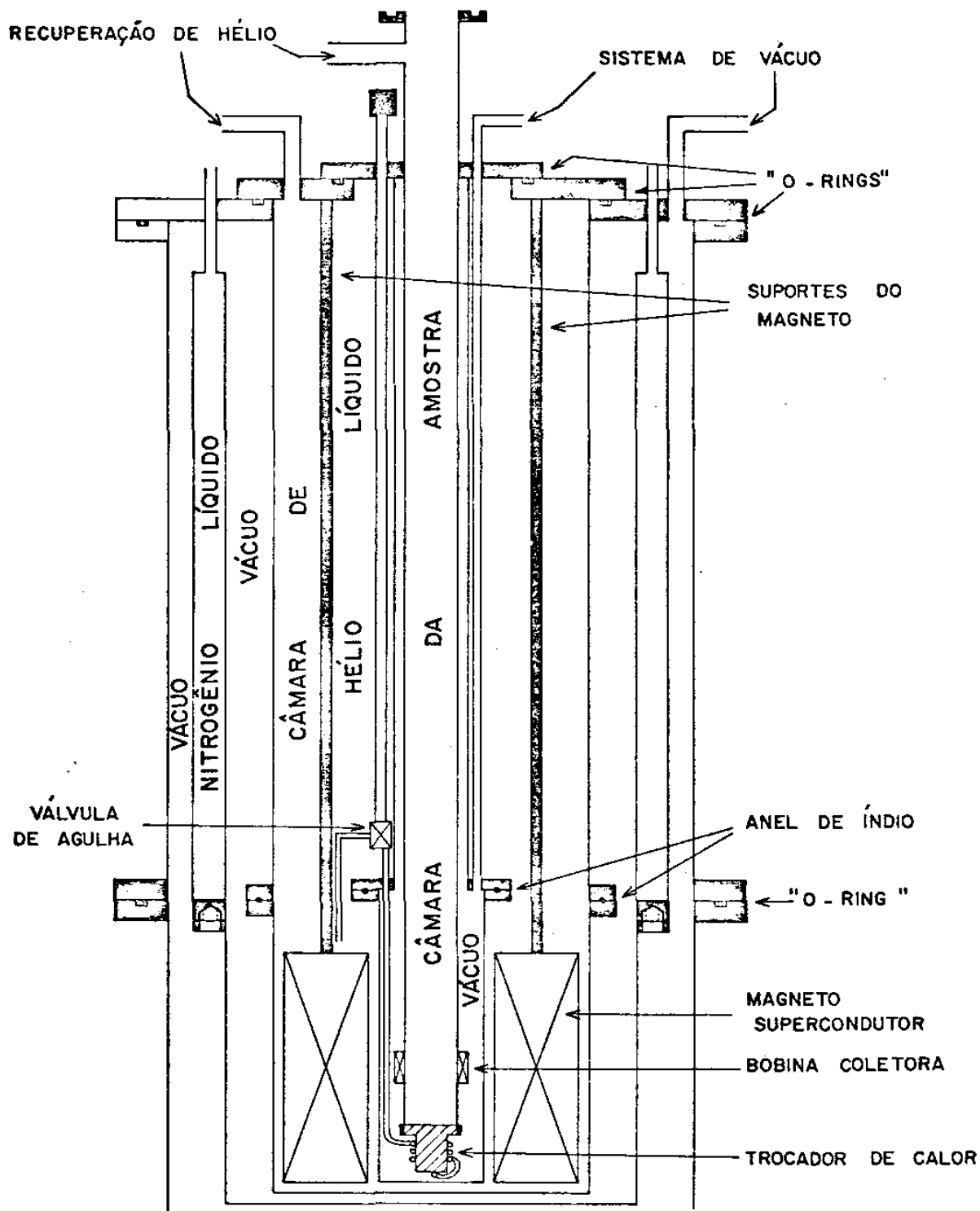


Fig.(II-1) - Esquema dos Criostatos.

o apagamento do efeito supercondutor. A fonte fornece um sinal de 1,25 mV/A, com que se pode monitorar a corrente no magneto. A razão campo-corrente fornecida pela Oxford para esta unidade é 1,7139 kOe/A. O gerador eletromecânico permite que o valor máximo da corrente seja atingido em 1, 2, 5, 10, 20, 50, 100 ou 200 minutos. A maior velocidade com que este magneto pode ser carregado foi de 7,5 kOe/min (escala de 10 minutos).

O criostato principal (Oxford) suporta o magneto. A parte externa e o reservatório de nitrogênio líquido, para blindagem de radiação térmica, são de alumínio, e o reservatório de hélio líquido é de aço-inoxidável. Estes três recipientes estão separados entre si por vácuo de isolamento. Há um trocador de calor entre os reservatórios de nitrogênio e de hélio, próximo a flange superior, para acelerar o resfriamento da câmara do magneto. O magneto supercondutor é suspenso por três tubos de aço-inoxidável em uma flange que é fixada na flange do criostato.

O criostato de temperatura variável (varitemp) utilizado é do tipo de fluxo de gás e foi construído especificamente para este sistema. Ele é isolado por vácuo até a flange superior. Nesta região está localizada a bobina de coleção de sinal do magnetômetro e o tubo capilar de aço-inoxidável (0,8 mm de diâmetro) que leva o hélio líquido do criostato principal até a base da câmara da amostra, onde há um trocador de calor, aquecido externamente, para o pré-aquecimento do gás que atinge a amostra. O hélio líquido do criostato principal é pressurizado e o seu acesso a câmara da amostra é através de uma válvula de agulha e do tubo capilar. A flange superior tem acessos para o suporte de amostra, sistema de recuperação de hélio e sistema de vácuo de isolamento do varitemp. Além disso, contém o parafuso de controle da abertura da

válvula de agulha e as passagens de fio para a bobina de coleção de sinal e para o resistor do trocador de calor. O diâmetro interno da câmara da amostra é de 25 mm.

II.2 - Controle de Temperatura -

O controle de temperatura foi feito por um controlador eletrônico construído baseado no modelo 152 da Princeton Applied Research (PAR). O elemento sensor é um diodo de GaAs. Ele recebe corrente constante de 10 μ A e a propriedade termométrica usada como sensora é a queda de tensão, que é fortemente dependente da temperatura (~ 3 mV/K). Esta tensão é comparada com uma de referência (ponto selecionado) por um amplificador diferencial. O ponto selecionado é escolhido em um potenciômetro linear calibrado, em função da tabela de calibração temperatura-tensão do diodo. A tensão de erro é processada para atuar sobre o aquecedor da região do sensor (e da amostra), no sentido de eliminar esta diferença, por um amplificador que fecha o elo de realimentação. Três termos contribuem para o processamento da tensão de erro: o proporcional, o diferencial e o integral. O termo proporcional atua no aumento ou diminuição da corrente do aquecedor, no sentido de diminuir o sinal de saída do amplificador diferencial. Em temperaturas afastadas do ponto selecionado, o integrador não atua e a corrente aplicada no aquecedor é no sentido de corrigir rapidamente a temperatura. Próximo ao equilíbrio (ponto selecionado), o integrador tenta manter uma corrente para correção rápida, enquanto o diferenciador age no sentido de diminuir a variação rápida da temperatura, para evitar instabilidade devido a supercorreções. A estabilidade e precisão conseguidas dependeram dos suportes de amostra e serão discutidas posteriormente.

Os diodos de GaAs usados foram os da Lake Shore Cryotronics Inc., do tipo /M, pouco sensíveis ao campo magnético. Embora as unidades utilizadas tenham sido de pior comportamento frente

ao campo do que as especificações de fábrica, elas alteram muito pouco a precisão dos resultados experimentais obtidos e nenhuma correção foi feita. Dos diodos utilizados, o mais sensível fez com que na temperatura de 250 K, a 35 kOe, o controlador mantivesse a temperatura 1 K mais baixa do que a selecionada. Em uma progressão aproximadamente exponencial, esta diferença chegou a 3 K em campo de 70 kOe.

Os diodos foram calibrados relativamente a um termopar de cobre-constantan, embora ele seja pouco sensível abaixo de 20 K. Mas, uma vez que nenhuma propriedade do térbio depende criticamente da temperatura nesta região, isto é pouco relevante. Durante a calibração, os diodos foram colados em um suporte de cobre, com verniz GE-7031, próximos a junção do termopar, colada em um pequeno furo com o mesmo verniz. A junção de referência foi colocada em uma mistura de água destilada com gelo de água destilada, em equilíbrio térmico, a qual se atribuiu a temperatura do ponto triplo da água, 273,2 K. A fem do termopar foi medida com um potenciômetro Leeds & Northrup (modelo K-1), usando uma célula padrão da Eppley e um detector de zero da Sullivan (modelo 3333). A equivalência fem-temperatura foi feita com uma tabela do National Bureau of Standard Calibration (USA). Durante a calibração, um dos diodos foi usado com o controlador, para estabilizar a temperatura do suporte de cobre. Após a primeira calibração (3 diodos), os outros diodos foram calibrados em função dos primeiros. Os intervalos de temperatura em que as medidas da fem foram feitas, estiveram de acordo com as recomendações do fabricante, e a tabela de calibração (fem(T)) de grau em grau, para cada diodo, foi obtida por interpolação, entre 4 K e 320 K.

Os aquecedores empregados foram de 40 Ω , enrolados com constantan ou manganin, com formas que dependeram do suporte de

amostra. A prática mostrou ser útil o emprego de dois aquecedores. O primeiro, mostrado na fig.(II-2), é fixo e aquece o trocador de calor da base da câmara da amostra, sendo controlado manualmente pela aplicação de potência. O trocador tem a função de não permitir a coleção de hélio líquido na câmara da amostra e de pré-aquecer o gás do fluxo usado no controle da temperatura. Além disso, ele foi usado durante a troca de amostra, para provocar um fluxo de hélio gasoso para o ambiente, impedindo que a umidade do ar condensasse nas paredes da câmara da amostra. O segundo aquecedor foi colocado nas imediações da amostra, e foi usado para o controle de temperatura propriamente dito. Para o magnetômetro, o aquecedor foi enrolado em um trocador de calor localizado aproximadamente 25 mm abaixo da amostra. O trocador consiste de um anel de latão fechado com grades de cobre, entre os quais há malha de cobre (fig.(II-3)). Com o ultrassom, o aquecedor pode ser enrolado diretamente nos suportes de amostra, como mostram as figs.(II-4) e (II-5).

II.3 - Suportes de Amostra -

Foram usados três suportes de amostra: um para medidas de magnetização, com o magnetômetro, e outros dois para as medidas de constantes elásticas, com campo paralelo e perpendicular a direção de propagação do ultrassom.

O suporte de amostra do magnetômetro consiste essencialmente de um tubo de aço-inoxidável preso ao capacitor de placas vibrantes. A fig.(II-3) mostra a extensão desta barra, que permite a colocação e o alinhamento da amostra. A amostra era colada com cerniz GE-7031 em uma peça de lucite, com face plana, e secada a quente (-80 C).

As figs.(II-4) e (II-5) mostram, respectivamente, os suportes de amostra para medidas de constantes elásticas com ondas paralelas e perpendiculares ao campo. Nestes dois suportes, o diô

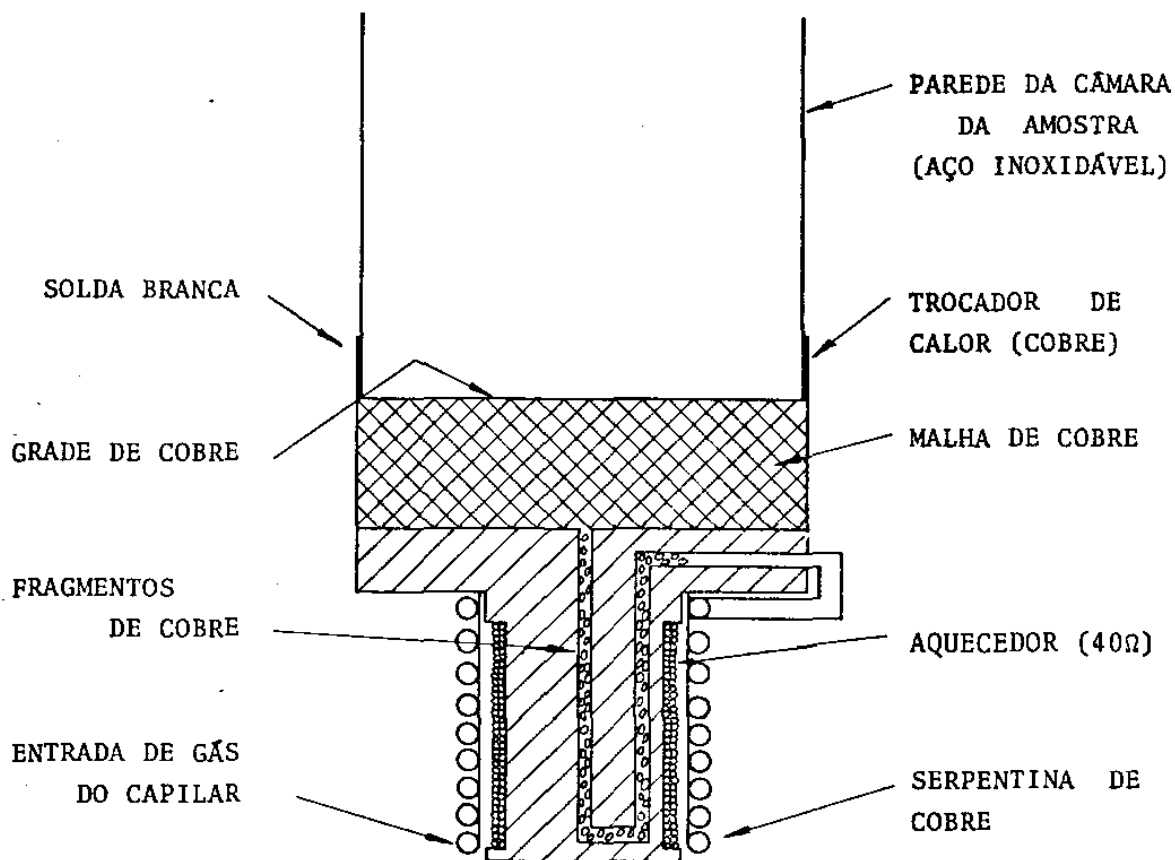


Fig.(11-2) - Trocador de Calor da Base da Câmara da Amostra.

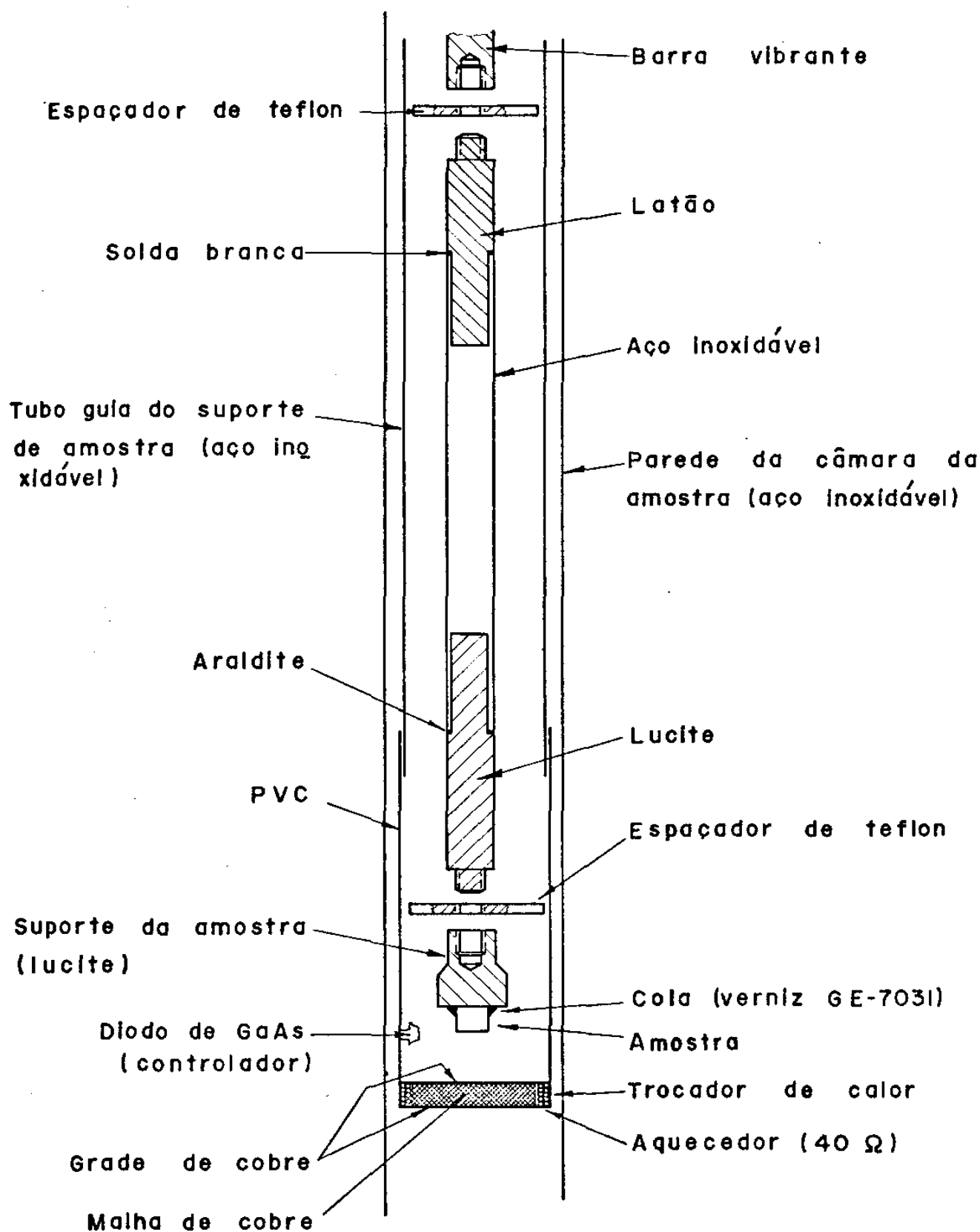


Fig.(II-3) - Suporte de Amostra do Magnetômetro.

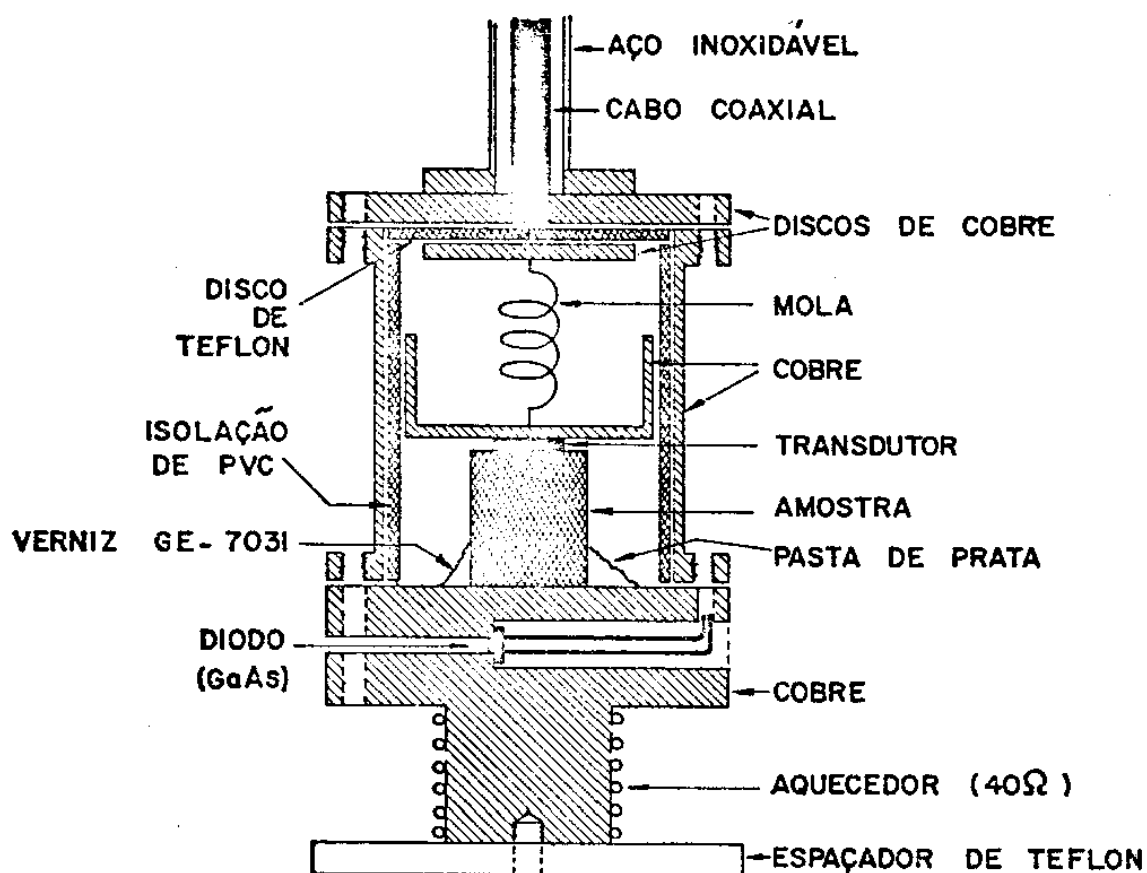


Fig.(II-4) - Suporte de Amostra do Ultrasom para $k//\vec{H}$.

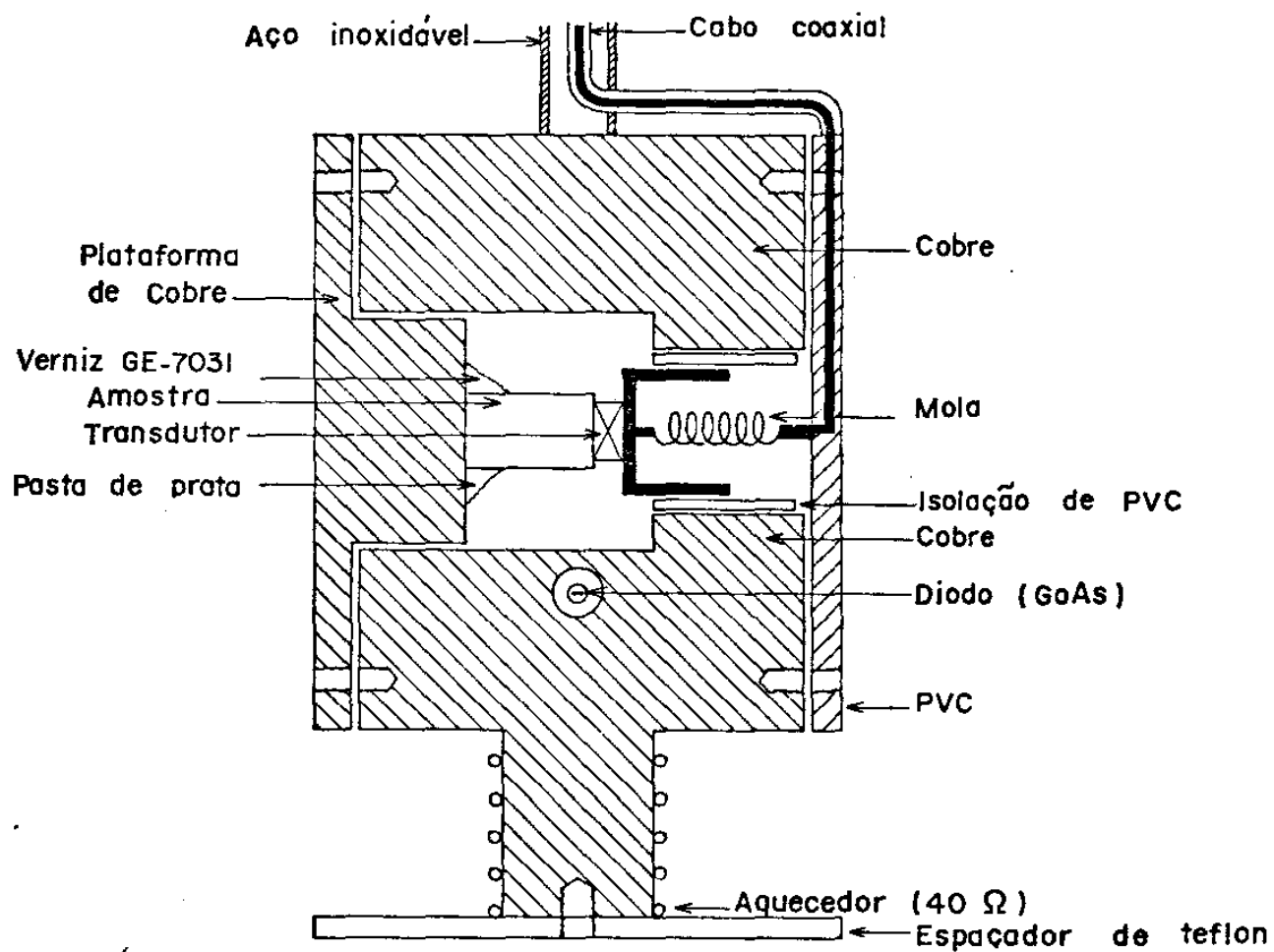


Fig.(II-5) - Suporte de Amostra do Ultrassom para $\vec{k} \perp \vec{H}$.

do e o aquecedor do contrôlador estão no mesmo bloco de cobre em que a amostra é colada. A estabilidade da temperatura conseguida com estes dois suportes, foi melhor do que a conseguida com o do magnetômetro, e o tempo necessário para estabilização foi bastante menor.

Nas medidas de magnetização, a pressão do criostato principal foi mantida em cerca de $0,15 \text{ kg/cm}^2$ ($\sim 2 \text{ lb/pol}^2$). O hélio líquido era assim forçado a entrar na câmara da amostra, através da válvula de agulha. O diâmetro da base da válvula de agulha é de 1 mm e o ângulo é de $1,6^\circ$. Típicamente, para que a amostra fosse mantida a 300 K, a abertura da válvula de agulha foi de cerca de $0,035 \text{ mm}^2$ ($\sim 1/2$ volta), com corrente no aquecedor da base da câmara da amostra de aproximadamente 700 mA (~ 19 watts). Nestas condições, o fluxo de gás na região da amostra era de 5 a 10 litros/min e a corrente no aquecedor de controle era da ordem de 300 mA (~ 4 watts). A melhor posição encontrada para o diodo, para que fosse mínima a sua diferença de temperatura com a amostra, foi na parede de PVC (fig.(II-3)), cerca de 5 mm abaixo da amostra. Um termopar, com uma junção colocada em uma amostra simulada e outra em um diodo simulado, indicou uma flutuação relativa não superior a 0,5 K, em algumas temperaturas entre 4,2 K e 300 K. Temperaturas menores foram controladas com correntes menores no aquecedor da base. O fluxo de gás era lido em um rotâmetro e a abertura da válvula de agulha podia ser ajustada para dar o fluxo desejado.

Nas medidas de constantes elásticas, a válvula de agulha foi mantida fechada e o controle de temperatura foi feito sem fluxo de gás, apenas com o aquecedor do suporte da amostra. A 300 K, a diferença de temperatura entre o diodo e a amostra, medida com termopar, foi de 0,5 K, caindo a praticamente zero abaixo de 270 K. O diodo estava localizado entre o aquecedor e a amostra, e, devido a radiação térmica, quando houve diferença, a temperatu

ra da amostra era menor do que a do diodo. Esta diferença podia ser evitada mantendo fluxo de gás, as custas de um maior consumo de hélio líquido.

II.4 - O Magnetômetro -

O objetivo de um magnetômetro é medir o momento magnético de uma amostra magnetizada. Nós utilizamos um magnetômetro de amostra vibrante (PAR - modelo 155), cujo esquema simplificado aparece na fig.(II-6). A amostra, situada em um campo magnético, adquire um momento magnético, produto de sua susceptibilidade magnética pelo campo magnético. Quando ela é colocada em vibração senoidal, no sentido vertical, no eixo de uma bobina para coleção de sinal, produz nesta um sinal ac, que depende do valor do momento magnético, da amplitude e da frequência de vibração. O movimento vertical é conseguido pela passagem de corrente ac em uma bobina de cobre sob ação de um imã permanente. A bobina é suspensa por molas de bronze fosforoso, de um modo que só ocorre movimento no sentido vertical.

Neste magnetômetro, o momento magnético medido é independente de pequenas flutuações na amplitude e na frequência de vibração. Isto é conseguido pela inclusão de um capacitor vibrante, solidário a bobina transdutora e a amostra, no elo de realimentação. Quando um sinal dc é aplicado as placas moveis do capacitor, surge nas placas fixas um sinal ac, que depende do nível do sinal dc, da amplitude e da frequência de vibração. O propósito do magnetômetro é obter um sinal dc, que aplicado as placas móveis, provoque nas placas fixas um sinal idêntico ao da bobina coletora, zerando a saída do amplificador diferencial. O sinal dc é independente da amplitude e da frequência e é proporcional ao momento magnético da amostra.

Normalmente, a cabeça do magnetômetro permite o ajuste da amostra relativamente a bobina coletora, em duas direções horizon

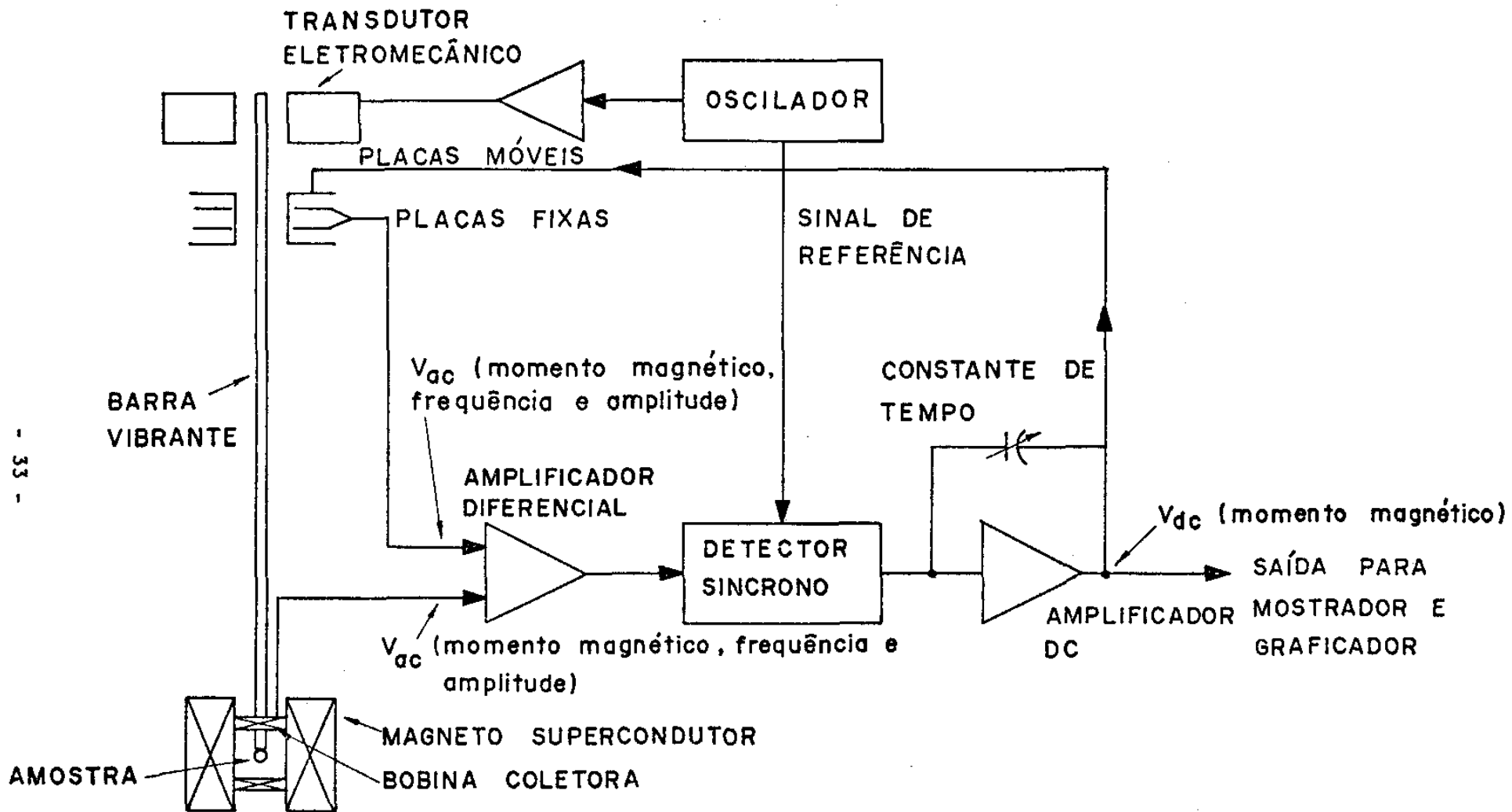


Fig.(II-6) - Diagrama Esquemático do Magnetômetro.

tais e uma vertical. Mas no sistema criogênico, a câmara da amostra é fixa nos criostatos, e os ajustes horizontais foram perdidos. Esta perda foi compensada parcialmente com um nivelamento cuidadoso entre a cabeça do magnetômetro e o magneto, e com o alinhamento da bobina coletora com o eixo do varitemp.

O momento magnético pode ser lido em dois mostradores, um de ponteiro e outro digital. Ambos indicam o valor em emu, dividido por um fator que pode ser escolhido entre 10^2 , 10, 1, 10^{-1} e 10^{-2} . O mostrador digital (3 dígitos) indica valores de até ± 999 . Ao fundo de escala dos mostradores (± 1.000), a saída para registrador atribui os valores de ± 10 V. A calibração depende da geometria do sistema amostra-bobina coletora e deve ser feita através de uma amostra de curva de magnetização conhecida. Os detalhes da calibração neste sistema estão na seção (II.8). A bobina coletora foi enrolada em uma peça de PVC, em duas partes simétricas em relação a amostra, em planos perpendiculares a direção de vibração. A especificação de fábrica indica que este magnetômetro pode medir com precisão de 2% e que a reprodutibilidade dos resultados é melhor do que 1%. Nenhum dos testes e medidas realizados neste trabalho contradiz esta afirmação, embora estes limites possam ter sido um pouco excedidos por outros fatores experimentais, como instabilidade na temperatura e influência do campo magnético no sensor.

II.5 - O Sistema de Ultrasom -

O sistema de ultrasom permite a medida da velocidade e da atenuação das ondas elásticas na matéria. Isto é feito pela aplicação de pulsos de rf de alta potência, de frequência constante, com frequência de repetição controlável, em transdutor piezoelétrico em contacto com a matéria. O transdutor - usualmente de quartzo - converte os pulsos de rf em pulsos de ondas elásticas. Estes pulsos são parcialmente refletidos nos limites da amostra e

as várias ordens de reflexão (ecos) são detectadas pelo mesmo transdutor e convertidas novamente em pulsos de rf. O sistema eletrônico detecta estes sinais, que são muito menores do que os pulsos aplicados, amplifica-os, e fornece uma saída do trem de ecos para a tela de um osciloscópio. A velocidade das ondas elásticas está relacionada com as constantes elásticas do material (apêndice A) e é medida pelo retardo entre ecos. A atenuação resulta da interação das ondas elásticas com a matéria e com as excitações presentes, e é medida pela comparação entre as amplitudes dos ecos.

Nós usamos um sistema Matec próprio para medidas de velocidade pelo método de sobreposição de ecos. Este método foi desenvolvido por May⁴¹ e Papadakis⁴² e posteriormente por Chung et al.⁴³, para medir simultaneamente atenuação e velocidade. Para o problema específico deste trabalho, este método apresenta algumas vantagens sobre o método alternativo de sobreposição de pulsos, desenvolvido por McSkimin⁴⁴. O método de sobreposição de pulsos requer que a frequência de repetição do gerador de rf seja igual ao inverso do tempo de viagem do pulso dentro da amostra, multiplicado por $1/m$ ($m=1,2,3,\dots$). Assim, as ondas geradas por vários pulsos ficam presentes na amostra simultaneamente e os ecos dos vários pulsos são sobrepostos. Supondo, por exemplo, que a razão de repetição seja metade do inverso do tempo de viagem, quando o 1º eco de um pulso atinge o transdutor, ele chega com o 3º do precedente, com o 5º do anterior a este e assim por diante. Para amostras pequenas, as frequências de repetição necessárias podem ser muito grandes, podendo sobrecarregar o gerador de rf, já que os pulsos são de alta tensão.

No método de sobreposição de ecos a frequência de repetição é baixa e um pulso de rf é totalmente absorvido antes de outro ser aplicado. Inicialmente, o trem de ecos é disposto na tela.

do osciloscópio ciclo a ciclo, mas uma vez que a frequência de repetição é da ordem de 1 kHz, ele aparece contínuo. Os dois ecos que se deseja sobrepor podem então ser escolhidos e pulsos de intensificação ser colocados sobre eles, em sincronismo com os pulsos do gerador de rf. Desta forma, podemos fazer com que apenas estes dois ecos sejam visíveis na tela. A sobreposição entre ambos pode ser feita na tela, engatilhando o osciloscópio com uma frequência (f) igual ou múltipla de $1/\tau$, onde τ é a separação de tempo entre os ecos. Esta frequência é fornecida por um gerador de áudio e medida em um frequencímetro, e a sobreposição própria-mente dita, pode ser verificada visualmente na tela do osciloscópio, enquanto se faz o ajuste manual da frequência. Esta frequência é dividida - por 10, 100 ou 1000 neste equipamento - e serve para engatilhar o gerador de rf e os pulsos de intensificação, em sincronismo. Vamos supor que os ecos escolhidos tenham os números de ordem m e n. τ é o tempo gasto por um pulso para fazer (n-m) viagens de ida e volta no cristal. A velocidade da onda elástica então é

$$v = 2\ell(n-m)/\tau = 2\ell(n-m)f \quad (\text{II-1})$$

onde ℓ é a distância entre as faces da amostra.

As terras raras são fortemente atenuantes, principalmente em temperaturas próximas das transições de fase, e poucos ecos podem ser observados. Em altos campos magnéticos a magnetoestrição é acentuada, e isso contribui para a atenuação e distorção dos ecos, tanto pela interação entre a onda elástica e a matéria, como pelas modificações na ligação transdutor-amostra. O método de sobreposição de ecos é mais apropriado do que o de pulsos para medidas de velocidade e atenuação nestes materiais, por duas razões principais: 1- a frequência de repetição é baixa e porisso ele permite a aplicação de pulsos de mais potência (~1 kW) no transdu

dutor, sem sobrecarregar o gerador, o que facilita a medição da velocidade em materiais fortemente atenuantes; 2- neste método, é suficiente que se tenha dois bons ecos para a medida de velocidade, enquanto no de sobreposição de pulsos, são necessários vários, para que a precisão não fique comprometida. Além disso, o método da sobreposição de ecos permite a medição simultânea de atenuação e velocidade.

A fig.(II-7) mostra esquematicamente o sistema de ultrassom e nós fazemos aqui uma breve descrição de seus componentes e suas funções. O gerador de áudio é um oscilador de onda contínua (Tektronix - FG501) que gera ondas com frequências de 0,001 Hz até 1 MHz. Esta frequência é medida em um frequencímetro digital (Tektronix - DC501). A velocidade é determinada através da frequência do oscilador na sobreposição dos ecos, e a precisão da medida depende então da estabilidade do oscilador e da precisão do frequencímetro. O frequencímetro tem uma estabilidade melhor do que 1 parte em 10^5 e a estabilidade do oscilador foi bastante melhor do que a especificada pelo fabricante (0,1% em 10 minutos). As séries de medidas de constantes elásticas duraram cerca de 30 minutos, em que a temperatura da amostra era mantida constante, e a frequência de sobreposição dos ecos (80-300 kHz) era medida para vários valores de campo magnético. Neste intervalo de tempo, a frequência do oscilador flutuava de ± 5 Hz ($\sim 0,007\%$ em 30 minutos). Erros de 5 Hz na medida da frequência significam erros na medida da variação relativa das constantes elásticas ($\Delta C/C$) de -7×10^{-5} (para $f=150$ kHz), muito menores do que os valores medidos (capítulo IV). A frequência de sobreposição pode ser ajustada, enquanto se observa visualmente a sobreposição dos ecos no osciloscópio. O seu valor aproximado é escolhido no painel do oscilador e o ajuste fino é conseguido pela aplicação de um sinal dc, ajustável manualmente por um potenciômetro, em uma entrada para frequência

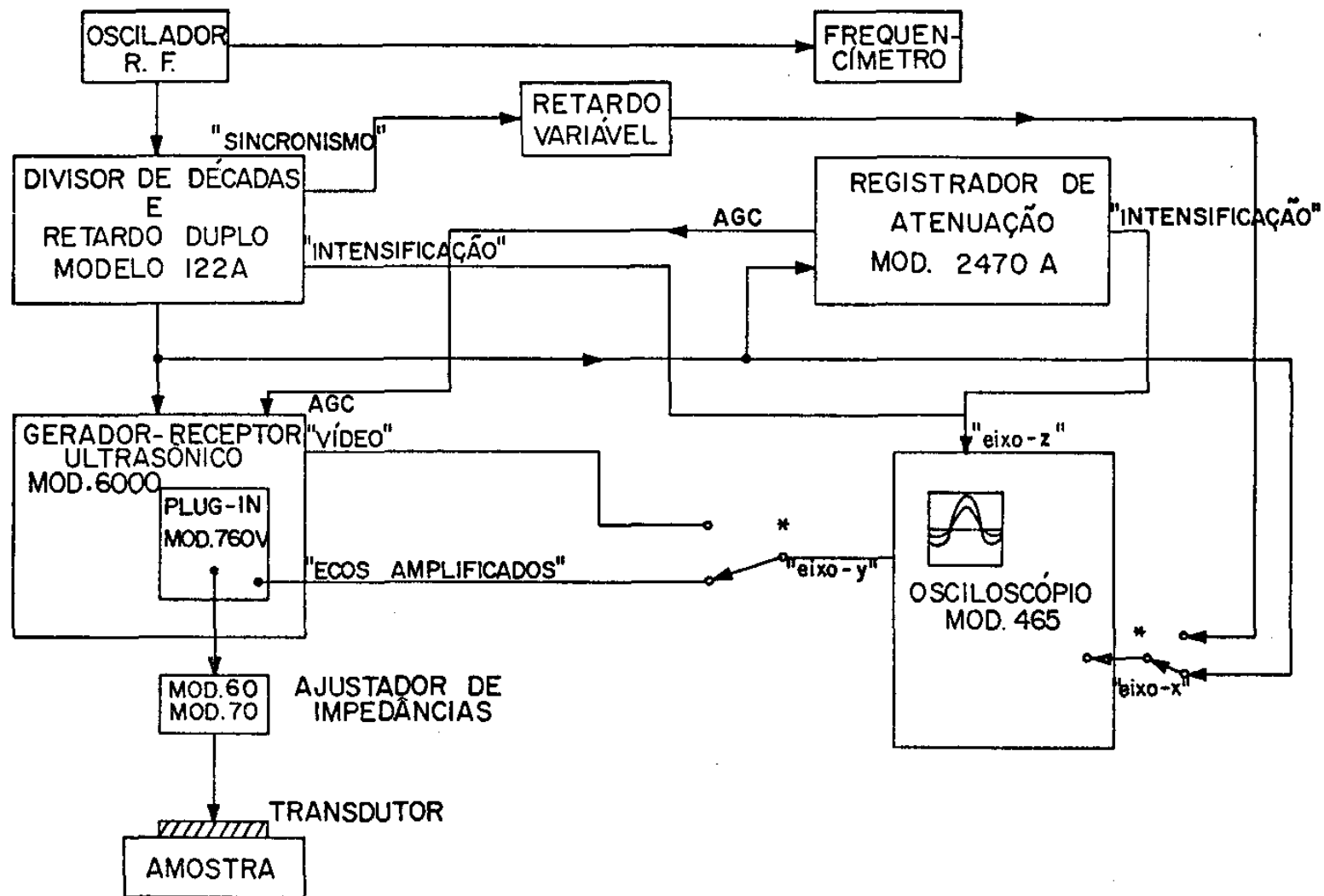


Fig.(II-7) - Diagrama Esquemático do Sistema de Ultrasom.

controlada tensão.

O divisor de décadas e gerador de retardo duplo (Matec - 122A) recebe o sinal do oscilador e executa 3 funções principais: 1- produz um sinal de sincronismo na saída, que é uma onda quadrada com frequência de 1/10, 1/100 ou 1/1000 da frequência de entrada. Este sinal engatilha o gerador de rf e determina a frequência de repetição; 2- produz outro sinal de sincronismo, também de onda quadrada, com a mesma frequência do sinal de entrada. Este sinal engatilha o eixo horizontal do osciloscópio; 3- produz dois pulsos de intensificação, positivos ou negativos, com retardos e larguras independentes. Os retardos podem ser ajustados até os valores máximos de 100 ou 1000 μ s. As larguras dos pulsos podem variar entre 1 e 8 μ s. Como o eixo horizontal do osciloscópio é engatilhado com a frequência do oscilador, e o gerador de rf com a frequência dividida, os dois ecos escolhidos ficam sobrepostos na tela do osciloscópio, na frequência apropriada, devido a fosforescência da tela.

O gerador-receptor de rf (Matec - 6000) pode ser utilizado com diferentes unidades encaixáveis, que permitem a produção de pulsos de rf com frequências de 1 a 700 MHz. O módulo utilizado (Matec - 760V) permite operar entre 10 e 90 MHz. A geração de rf se dá em um amplificador do tipo puxa-empurra, onde pulsos quadrados positivos, defasados de 180° , são aplicados às grades de controle de 2 tetrodos 4CN15 (Eimac). O sinal do anodo estabelece um circuito LC sintonizável. A frequência dos pulsos de rf é escolhida no painel do módulo, pela escolha do valor de L. O capacitor é fixo e formado pelo sanduíche amostra (terra) - transdutor-contato de alta tensão (gerador de rf) (figs. (II-4) e (II-5)). A amplitude e largura dos pulsos quadrados aplicados às grades de controle podem ser ajustadas por dois potenciômetros no painel do receptor. A frequência de repetição é determinada pelo divisor de

décadas e está na faixa 0-2500 Hz. O limite superior é determinado pela carga da "eletrônica", e depende de fatores como largura, amplitude, etc. Frequências de repetição nas faixas 5-50 Hz e 50-500 Hz podem ser obtidas internamente. Os pulsos que voltam do transdutor são processados por dois amplificadores diferentes. Uma parte passa por um amplificador de banda larga, com ganho de 20 db. Este sinal vai para o monitor do receptor, onde fica acessível para medidas de velocidade, através do osciloscópio. A outra parte é convertida para 60 MHz e amplificada por um amplificador de frequência intermediária. Na saída deste amplificador, as amplitudes são detectadas, os ecos filtrados, e as envoltórias dos ecos ficam disponíveis para o vídeo e para o medidor de atenuação.

Como vídeo foi usado o osciloscópio Tektronix modelo 465, de resposta até 100 MHz. Depois de intensificados os dois ecos a serem sobrepostos, os outros são apagados, usando o potenciômetro de intensidade do osciloscópio. Aumentando a velocidade de varredura, os ecos em questão ficam sobrepostos na tela. Para facilitar a sobreposição dos pulsos na parte central da tela, foi introduzido um multivibrador monoestável em série com o sinal de sincronismo do divisor de décadas, de modo a ajustar o retardo do sinal que engatilha o eixo horizontal.

A impedância de saída do gerador de rf é 50 Ω e a condição de máxima transmissão de potência é de que a carga também seja de 50 Ω . As condições de ressonância podem ser melhoradas pelo emprego de casadores de impedância, entre o gerador de rf e a carga capacitiva (transdutor). Em algumas medidas deste trabalho foram usadas as unidades 60 e 70 da Matec, com esta finalidade.

A atenuação foi medida com o medidor de atenuação Matec -2470, que permite o registro simultâneo de atenuação com medida de velocidade. O modo básico de funcionamento consiste na seleção

e detecção de 2 pulsos do trem de ecos, a ser comparados. Os 2 pulsos são selecionados por intensificação no trem de ecos, e suas alturas são comparadas logarítmicamente. Os retardos e as larguras dos pulsos de intensificação são ajustáveis e um controle automático de ganho (AGC) mantém constante a altura do primeiro e co selecionado. Este sistema permite medir atenuações de até 32 db, com precisão melhor do que 0,2 db. No entanto, a precisão das medidas depende também da qualidade dos ecos, ou equivalentemente, da qualidade da amostra, da ligação transdutor-amostra, etc. Devido a comparação logarítmica, a melhor performance ocorre quando a amplitude dos ecos decai exponencialmente com a sua ordem. O sinal de sincronismo é obtido do divisor de décadas e é o mesmo do gerador de rf. Ele tem uma saída para registrador.

II.6 - Transdutores e Ligação Transdutor-Amostra -

Os transdutores piezoelétricos usados foram placas de quartzo cristalino com placas paralelas, da Valpey-Fisher Co. Eles respondem com ondas elásticas de vetor de onda (\vec{k}) perpendicular as faces, a campos elétricos oscilantes aplicados nesta direção. Estas ondas podem ser aplicadas a uma amostra convenientemente ligada ao transdutor, que pode também detectá-las, após sua interação com a matéria. A polarização da onda depende da orientação cristalina da placa de quartzo. Para ondas longitudinais e transversais foram usados, respectivamente, transdutores com cortes X e Y⁴⁵. A frequência natural de oscilação é inversamente proporcional a espessura das placas, e dependendo da qualidade do polimento das faces, harmônicos ímpares podem ser excitados. Os transdutores utilizados para ambos os tipos de onda, foram de 10 e 20 MHz, com espessuras de alguns décimos de milímetro. Eles foram cortados a partir de placas circulares maiores. Os longitudinais em discos de -3,2 mm de diâmetro e os transversais em retângulos de -4,0x2,5 mm, mantendo-se no lado maior a direção da pola

rização, indicada por um corte na lateral do disco maior. Embora todos os transdutores usados fossem polidos, as medidas descritas foram todas obtidas com os modos fundamentais, porque a qualidade dos ecos obtidos com os harmônicos ímpares não foi boa.

Foram tentados 3 materiais na ligação transdutor-amostra: graxa Nonaq (Nonaq Stopcock Grease), graxas de silicone de várias viscosidades (Dow Corning) e araldite (comercial - 15 minutos). As duas primeiras classes são usadas com muita frequência como elementos de ligação, devido principalmente a facilidade de aplicação. Estas graxas deram bons resultados a temperatura ambiente, isto é, os ecos obtidos foram de boa qualidade. Isto deixou de ocorrer em temperaturas menores do que 250 K, devido principalmente ao seu enrigecimento e a consequente quebra da ligação, provocada pela magnetoestrição. A araldite deu bons resultados em todas as temperaturas, tendo como único inconveniente, a dificuldade em remover o transdutor, depois de seca. Seu uso é particularmente eficiente no acoplamento de ondas transversais, uma vez que ela é bastante rígida.

As ligações foram sempre feitas no início do processo de secagem da araldite. Nesta fase, se o comportamento dos ecos fosse considerado satisfatório, a araldite era secada a quente (~80 C). Se não o fosse, a ligação era desfeita, transdutor e amostra eram limpos, e uma nova ligação era tentada. A remoção do transdutor depois de seca a araldite, foi feita colando a face da amostra com transdutor em uma placa de cobre, com verniz GE-7031, e secando a ~80 C. A posterior dissolução do verniz com acetona liberava a amostra do transdutor, devido provavelmente ao ataque toluol presente no verniz, como diluente.

II.7 - A Amostra -

A amostra de térbio foi cortada de um cristal maior, pro-

duzido pela Metals Research Co. com pureza de 99,9 %. A massa é de 0,7518 g e ela tem faces paralelas entre si, ortogonais aos eixos a e c. A distância média entre as "faces a" é de 5,000 mm e entre as "faces c", de 3,723 mm. O não paralelismo entre as faces é menor do que $0,03^\circ$ e a sua não ortogonalidade com os eixos, é menor do que 2° . A qualidade dos ecos foi sempre melhor para as ondas aplicadas ao longo do eixo c e isso foi levado em consideração na decisão sobre a qualidade de uma determinada ligação.

II.8 - Procedimento Experimental -

O trabalho experimental propriamente dito, começava pela evacuação das câmaras de isolamento térmica, no criostato do magneto e do varitemp, com dois sistemas compostos de bomba primária mais bomba de difusão. Uma vez que todo o hélio utilizado era recuperado, fazia-se vácuo de limpeza (bomba primária) nas câmaras do magneto e da amostra. Para minimizar a frequência de bloqueio da válvula de agulha por condensação de impurezas, as câmaras do magneto e da amostra eram enchidas algumas vezes com gás puro, e este era forçado a passar pela válvula nos dois sentidos. O resfriamento do sistema começava pelo enchimento do reservatório de nitrogênio líquido. A temperatura do magneto era monitorada por um termopar (cobre-constantan) e a transferência de hélio líquido só era feita quando a sua temperatura estava próxima de 100 K (-20 horas). A linha de transferência ficava permanentemente dentro do criostato, devido a dificuldade em mover a cabeça do magnetômetro. No início da transferência, o hélio evaporado era forçado a passar pela válvula de agulha e pela câmara da amostra, para confirmar se não havia obstrução, e para reencher de gás puro a câmara da amostra, já que o gás do sistema de recuperação é bastante mais impuro do que o evaporado.

Para medir a magnetização da amostra, como função do cam-

po magnético e da temperatura, o magnetômetro foi calibrado com uma amostra cilíndrica de níquel, com massa de 0,843 g e de dimensões próximas das da amostra de térbio. A calibração foi feita sempre a 4,2 K e campo magnético de 30 kOe. A magnetização de saturação usada para o níquel foi de 57,5 emu/g. A colocação ou troca da amostra era feita desconectando a câmara da amostra da cabeça do magnetômetro, mantendo um fluxo de gás para o exterior. Após a colocação da amostra, abaixava-se a sua temperatura até 4,2 K (região ferromagnética), e ela era centrada geomêtricamente com a bobina coletora, pelo ajuste vertical, em campo magnético de 60 kOe. Com a geometria da bobina coletora usada (fig.(II-6)), o posicionamento vertical correto da amostra ocorre quando o valor indicado para o momento magnético é máximo. A temperatura de 4,2 K foi obtida permitindo a coleção de hélio líquido na câmara da amostra e mantendo um pequeno fluxo de gás, pela aplicação de uma potência de ~5 mW no trocador de calor da base da câmara da amostra. Esta temperatura foi escolhida para calibração e ajuste vertical da amostra por duas razões: 1- é estável e insensível a movimentos verticais do suporte de amostra, o que não ocorre com as temperaturas controladas eletronicamente; 2- as susceptibilidades magnéticas do térbio e do níquel são pouco dependentes da temperatura nesta região.

As curvas de magnetização contra campo magnético foram registradas em um registrador x-y (Hewlwt-Packard - modelo 7004-B), como função da temperatura. O eixo x foi calibrado para indicar 2 kOe/cm e o eixo y para indicar a magnetização em emu. O fundo de escala do eixo y foi escolhido como função da temperatura. O sinal para o eixo x foi tirado do monitor de corrente da fonte de potência do magneto e o do eixo y, do magnetômetro. O tempo de resposta do magnetômetro foi de 0,3 s e a velocidade de varredura do campo magnético foi escolhida como função da variação da magne

tização com o campo. As curvas com campo paralelo aos eixos a, b e c, foram registradas até 73 kOe, em várias temperaturas do intervalo 4,2-300 K. Entre 4,2 e 140 K, a cada 20 K; entre 150 e 210, a cada 10 K; entre 215 e 240, a cada 5 K; e entre 250 e 300 K, a cada 10 K. Devido a forte anisotropia magnética, foi difícil registrar as curvas de magnetização com o campo aplicado na direção c, em temperaturas menores do que T_N e campos maiores do que 10 kOe. Uma vez que a susceptibilidade do plano basal é muito maior do que a da direção c, pequenos erros de alinhamento, tanto no corte da amostra como na sua colagem, são suficientes para provocar um torque na amostra e no suporte e comprometer a medida. Mas uma vez que a atenuação do ultrassom foi muito intensa nestas condições, as medidas de velocidade não puderam ser feitas, e estes resultados não foram usados.

O alinhamento vertical na colocação da amostra, para medidas com ultrassom, não é tão crítico quanto com o magnetômetro, pois uma vez que o magneto é de alta homogeneidade, pequenas deslocamentos verticais, na região central do magneto, alteram muito pouco o valor do campo. Depois de estabilizada a temperatura da amostra, os ecos escolhidos eram sobrepostos e a frequência de sobreposição era medida. Aplicava-se então campo magnético crescente, parando em alguns valores e executando novas medidas da frequência de sobreposição, registrando-as manualmente juntamente com o sinal do monitor de corrente. Os intervalos de campo em que as medidas eram feitas foram escolhidos em função da variação da frequência de sobreposição com o campo. Para minimizar o erro visual cometido ao se aproximar as linhas dos dois ecos, com o potenciômetro de ajuste fino, a frequência de sobreposição foi lida quatro vezes e foi tomada a média. A frequência era lida quando as linhas dos dois ecos cruzavam o zero, duas por aproximação

crescente de frequência e duas por decrescente. Pelo uso da expansão de 10 vezes do eixo x do osciloscópio, apareciam de 2 a 3 ciclos (do ultrasom) na tela, mas a sobreposição foi feita sempre com o mesmo par de linhas.

As medidas de constantes elásticas e as curvas de magnetização foram tomadas nas mesmas temperaturas, e, para cada constante elástica, construiu-se uma tabela com campo magnético, frequência de sobreposição e magnetização reduzida. Estas tabelas aparecem no apêndice C. A magnetização reduzida é o valor da magnetização da amostra dividido pelo valor de saturação que foi tomado como sendo o valor medido a 4,2 K com campo de 70 kOe, 244,4 emu (325,1 emu/g). Foram medidas as seguintes constantes elásticas, com as respectivas direções dos vetores de onda (\vec{k}), polarizações (\vec{p}) e direções do campo magnético aplicado (\vec{H}):

$$C_{1111} (C_{11}) - \vec{k} // \vec{a} - \vec{H} // \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$$

$$C_{3333} (C_{33}) - \vec{k} // \vec{c} - \vec{H} // \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$$

$$C_{3131} (C_{55}) - \vec{k} // \vec{a} \quad \vec{p} // \vec{c} - \vec{H} // \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$$

$$C_{1313} (C_{55}) - \vec{k} // \vec{c} \quad \vec{p} // \vec{a} - \vec{H} // \vec{a}, \vec{c}$$

$$C_{2121} (C_{66}) - \vec{k} // \vec{a} \quad \vec{p} // \vec{b} - \vec{H} // \vec{a}, \vec{b}$$

Nenhuma correção foi feita na frequência, que levasse em consideração a espessura da ligação, pois o interesse maior foi na medida da variação relativa das constantes elásticas com a magnetização, e não nos seus valores absolutos. Uma vez que

$$v = 2\ell(n-m)f \quad (II-2)$$

temos

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{\Delta \ell}{\ell} + \frac{\Delta f}{f} \quad (II-3)$$

Como as constantes elásticas (C) se relacionam com a velocidade e a massa específica (ρ) por

$$C = \rho v^2 \quad (II-4)$$

temos

$$\frac{\Delta C}{C} = \frac{\Delta \rho}{\rho} + \frac{2\Delta v}{v} = \frac{\Delta \rho}{\rho} + \frac{2\Delta \ell}{\ell} + \frac{2\Delta f}{f} \quad (\text{II-5})$$

$\Delta \rho/\rho$ e $2\Delta \ell/\ell$ são termos de origem magnetoestrictiva e sua contribuição para as constantes elásticas foi desprezada. A dependência relativa medida foi tomada como

$$\frac{\Delta C}{C} = \frac{C(M, T_0) - C(M=0, T_0)}{C(M=0, T_0)} = 2 \frac{f(M, T_0) - f(M=0, T_0)}{f(M=0, T_0)} \quad (\text{II-6})$$

onde M representa a magnetização.

A maior parte dos resultados de ultrassom foi tomada com o registro simultâneo das curvas de atenuação em função do campo, usando o registrador x-y. O eixo x era dirigido pelo monitor de corrente do magneto e o y pelo registrador de atenuação.

Neste capítulo, o nosso propósito é desenvolver um modelo teórico que reúna todos os fenômenos que cooperam para o acoplamento magnetoelástico nas terras raras pesadas, e analisar como este acoplamento se manifesta no comportamento das constantes elásticas de 2ª ordem.

O comportamento das constantes elásticas como função da temperatura e da magnetização caracteriza a forte interação magnetoelástica existente nestes materiais. Os fenômenos magnetoelásticos de todos os tipos podem ser vistos como advindos da dependência da energia livre de Helmholtz do material com o estado de deformação da rede cristalina. Nas terras raras, esta dependência se manifesta através de duas interações, ambas fortemente dependentes do estado de deformação da rede: a interação de campo cristalino e a interação de troca. Vamos começar pela descrição do sistema elástico e da interação de campo cristalino, e depois proceder a descrição do sistema magnetoelástico.

III.1 - O Sistema Elástico -

O tensor das deformações infinitesimais ($\vec{\epsilon}$) de um cristal pode ser expresso através de suas componentes, em termos das coordenadas de um ponto antes (\vec{x}) e depois (\vec{x}') de uma deformação $\vec{u} = \vec{x}' - \vec{x}$:

$$\epsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1 \equiv \vec{a}, 2 \equiv \vec{b}, 3 \equiv \vec{c}) \quad (\text{III-1})$$

Este tensor pode ser decomposto em uma parte simétrica e outra antissimétrica, resultando

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\epsilon_{ij} + \epsilon_{ji}) + \frac{1}{2}(\epsilon_{ij} - \epsilon_{ji}) \quad (\text{III-2})$$

Usualmente, só a parte simétrica

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(\epsilon_{ij} + \epsilon_{ji}) \quad (\text{III-3})$$

é considerada no tratamento das propriedades elásticas. Entretanto, uma vez que nas terras raras as deformações podem ser grandes, devido ao forte acoplamento magnetoelástico, o termo antissimétrico (ou rotacional) pode ser relevante. Ele só difere de zero quando uma tensão transversal é aplicada no cristal. Notamo-lo por

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(\epsilon_{ij} - \epsilon_{ji}) \quad (\text{III-4})$$

A energia livre do sistema elástico, até 3ª ordem nas deformações, pode ser escrita como:

$$F_{el} = F_{el}^{(0)} + F_{el}^{(1)} + (1/2) \sum_{\substack{i,j,k,l \\ l=1}}^3 C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + (1/6) \sum_{\substack{i,j,k,l,m,n \\ l,m,n=1}}^3 C_{ijklmn} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \epsilon_{mn} \quad (\text{III-5})$$

onde os C_{ijkl} são as constantes elásticas de 2ª ordem e os C_{ijklmn} as de 3ª ordem. $F_{el}^{(0)}$ e $F_{el}^{(1)}$ representam o termo independente e o linear nas componentes de $\vec{\epsilon}$, respectivamente*.

Hã 5 constantes elásticas de 2ª ordem independentes em redes hcp ideais: C_{11} , C_{33} , C_{44} , C_{12} e C_{13} ; e 10 de 3ª ordem: C_{111} , C_{112} , C_{113} , C_{222} , C_{123} , C_{133} , C_{144} , C_{155} , C_{333} e C_{344} (usando a notação de Voigt).

As constantes elásticas de 2ª ordem são geralmente defini

*É comum o uso da notação de Voigt de condensação de índices, em problemas de elasticidade:

$$\begin{aligned} 1 &\equiv 11, xx, aa & 2 &\equiv 22, yy, bb & 3 &\equiv 33, zz, cc \\ 4 &\equiv 23(32), yz(z y), bc(cb) & 5 &\equiv 13(31), xz(z x), ac(ca) \\ 6 &\equiv 12(21), xy(y x), ab(ba) \end{aligned}$$

Em geral, nós evitamos esta notação, porque uma de nossas proposições é explicar diferenças do tipo $C_{ijij}(\vec{\sigma}) - C_{jiji}(\vec{\sigma}) \neq 0$ ($i \neq j$), onde o uso da condensação de índices seria confuso. Mas nós podemos usá-la em casos que não causem confusão.

das como

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \quad (\text{III-6})$$

As seis deformações cartesianas: ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} , ϵ_{xy} , ϵ_{xz} e ϵ_{yz} formam a base de uma representação hexadimensional redutível do grupo D_{3h} . Esta representação pode ser transformada em duas unidimensionais e duas bidimensionais irredutíveis, cujas funções de base são^{22,*}:

$$\begin{aligned} \epsilon^{\alpha,1} &= \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33} & \epsilon^{\alpha,2} &= 2\epsilon_{33} - \epsilon_{11} - \epsilon_{22} \\ \epsilon_1^{\gamma} &= \epsilon_{11} - \epsilon_{22} & \epsilon_2^{\gamma} &= \epsilon_{12} + \epsilon_{21} \\ \epsilon_1^{\epsilon} &= \epsilon_{23} + \epsilon_{32} & \epsilon_2^{\epsilon} &= \epsilon_{13} + \epsilon_{31} \end{aligned} \quad (\text{III-7})$$

Chamando de $\epsilon_i^{\Gamma,j}$ as funções de base da representação Γ , a energia livre do sistema elástico, de 2ª ordem nas deformações, pode ser escrita como:

$$F_{el}^{(2)} = \sum_{\Gamma} \sum_{j,j'} (1/2) C_{jj}^{\Gamma} \sum_i \epsilon_i^{\Gamma,j} \epsilon_i^{\Gamma,j'} \quad (\text{III-8})$$

onde os C_{jj}^{Γ} são constantes elásticas de 2ª ordem, da representação irredutível. Uma vez que só ocorre acoplamento entre funções de base da mesma representação, com o mesmo índice nas representações multidimensionais, $F_{el}^{(2)}$ pode ser reescrita como²²:

$$\begin{aligned} F_{el}^{(2)} &= (1/2) C_1^{\alpha} (\epsilon^{\alpha,1})^2 + C_{12}^{\alpha} \epsilon^{\alpha,1} \epsilon^{\alpha,2} + (1/2) C_2^{\alpha} (\epsilon^{\alpha,2})^2 \\ &+ (1/2) C^{\gamma} [(\epsilon_1^{\gamma})^2 + (\epsilon_2^{\gamma})^2] + (1/2) C^{\epsilon} [(\epsilon_1^{\epsilon})^2 + (\epsilon_2^{\epsilon})^2] \end{aligned} \quad (\text{III-9})$$

onde os C_{jj}^{Γ} estão relacionados com as constantes elásticas cartesianas por*(usando notação de Voigt):

$$\begin{aligned} C_1^{\alpha} &= (2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{13})/9 \\ C_2^{\alpha} &= (C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13})/18 \end{aligned}$$

*Os $\epsilon_i^{\Gamma,j}$ e os C_{jj}^{Γ} diferem dos de Callen e Callen²² por fatores constantes.

$$C_{12}^{\alpha} = (C_{33} - C_{11} + C_{13} - C_{12})/9 \quad (\text{III-10})$$

$$C^{\gamma} = C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$$

$$C^{\epsilon} = C_{44}$$

A energia livre do sistema elástico, de 3ª ordem nas deformações, no sistema cartesiano, pode ser escrita como⁴⁶:

$$\begin{aligned} F_{el}^{(3)} = & (1/6)C_{111}[\epsilon_1^3 + 3\epsilon_1\epsilon_2^2 - (3/2)\epsilon_1\epsilon_6^2 + (3/2)\epsilon_2\epsilon_6^2] \\ & + (1/6)C_{112}[3\epsilon_1^2\epsilon_2 + 3\epsilon_1\epsilon_2^2 - (3/4)\epsilon_1\epsilon_6^2 - (3/4)\epsilon_2\epsilon_6^2] \\ & + (1/6)C_{113}[3\epsilon_1^2\epsilon_3 + 3\epsilon_2^2\epsilon_3 + (3/2)\epsilon_3\epsilon_6^2] \\ & + (1/6)C_{222}[-3\epsilon_1\epsilon_2^2 + (9/4)\epsilon_1\epsilon_6^2 + \epsilon_2^3 - (3/4)\epsilon_2\epsilon_6^2] \\ & + (1/6)C_{123}[6\epsilon_1\epsilon_2\epsilon_3 - (3/2)\epsilon_3\epsilon_6^2] \\ & + (1/6)C_{133}[3\epsilon_1\epsilon_3^2 + 3\epsilon_2\epsilon_3^2] \\ & + (1/6)C_{144}(3\epsilon_1\epsilon_4^2 + 3\epsilon_2\epsilon_5^2 - 3\epsilon_4\epsilon_5\epsilon_6) + (1/6)C_{333}\epsilon_3^3 \\ & + (1/6)C_{155}(3\epsilon_1\epsilon_5^2 + 3\epsilon_2\epsilon_4^2 + 3\epsilon_4\epsilon_5\epsilon_6) \\ & + (1/6)C_{344}(3\epsilon_3\epsilon_4^2 + \epsilon_3\epsilon_5^2) \quad (\text{III-11}) \end{aligned}$$

III.2 - A Interação de Campo Cristalino e a sua Dependência com as Deformações -

A interação de campo cristalino ocorre nas terras raras pesadas com momento angular orbital total diferente de zero ($\vec{L} \neq 0$) e é devida a distribuição não esférica dos elétrons 4f. O campo elétrico produzido pelos átomos do cristal em cada íon, estabelece uma direção preferencial para a nuvem 4f. Os elétrons 4f são parcialmente blindados pelas camadas completas 5s e 5p, e o momento angular orbital não é apagado e sua direção depende da direção da orientação da nuvem 4f. Uma vez que o spin total (\vec{S}) se acopla com o momento angular orbital total pelo mecanismo de Russell-Saunders, a direção do momento angular total (\vec{J}), e portanto do momento magnético iônico, são determinados pelo campo cristalino.

Vamos considerar o efeito do campo cristalino em um elé-

tron que se move próximo a um íon de uma rede hcp. O potencial eletrostático tem a forma

$$V(\vec{r}_i) = \int \frac{e}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} dR \quad (\text{III-12})$$

onde \vec{r}_i descreve a posição do elétron i , $\vec{R}(R, \theta, \phi)$ descreve a posição dos íons e e é a carga eletrônica. $V(\vec{r})$ pode ser expandida em harmônicos esféricos em torno da origem e esta expansão tem a forma⁴⁷:

$$V(r, \theta, \phi) = 4\pi e \sum_{i=1}^N \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{1}{2\ell+1} \frac{r^{\ell}}{a_i^{\ell+1}} Y_{\ell}^m(\theta_i, \phi_i) * Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (\text{III-13})$$

onde N é o número de íons do cristal e suas posições são (a_i, θ_i, ϕ_i) . De uma forma fenomenológica,

$$V(r, \theta, \phi) = \sum_{\ell, m} A_{\ell}^m r^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (\text{III-14})$$

onde os A_{ℓ}^m representam as componentes do campo elétrico de simetria apropriada, e os $r^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$, os vários multipolos da distribuição eletrônica. Para redes hcp perfeitas, o potencial fica⁴⁸:

$$V(r, \theta, \phi) = A_2^0 r^2 Y_2^0(\theta, \phi) + A_4^0 r^4 Y_4^0(\theta, \phi) + A_6^0 r^6 Y_6^0(\theta, \phi) + A_6^6 r^6 [Y_6^6(\theta, \phi) + Y_6^{-6}(\theta, \phi)] \quad (\text{III-15})$$

onde o termo em $\ell=2$ inclui a possibilidade de redes com razão c/a não ideal⁴⁹. As constantes A_{ℓ}^m dependem da localização exata das cargas que contribuem para o potencial, e se uma distorção é aplicada na rede, movendo os íons para novas posições, $V(r, \theta, \phi)$ fica alterado. Em geral, vão aparecer termos de simetrias diferentes das que aparecem na eq.(III-15), e também os termos da rede original devem sofrer mudanças quantitativas. É importante notar que o potencial eletrostático é escalar.

Donoho⁵⁰ desenvolveu um modelo numérico, baseado em uma rede cristalina consistindo de um número finito de camadas com raios constantes, contendo íons da rede hcp, em que o potencial ele

trostático é calculado para vários valores do tensor $\vec{\epsilon}$. O cálculo inclui termos de até 2º grau nas componentes de $\vec{\epsilon}$, incluindo as contribuições simétricas e antissimétricas. Para exemplificar este método, vamos supor que desejamos encontrar os termos do potencial que dependem linear e quadraticamente de $\epsilon^{\alpha,1}$. Igualando todos os outros $\epsilon_i^{r,j}$ a zero, $\vec{\epsilon}$ pode ser escrito como:

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon^{\alpha,1}/3 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon^{\alpha,1}/3 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon^{\alpha,1}/3 \end{pmatrix} \quad (\text{III-16})$$

Agora, chamando de $A_{\ell}^m(\epsilon^{\alpha,1})$ os coeficientes dos $r^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ da eq.(III-14), e de $A_{\ell}^{m(0)}$ os valores para a rede original, os $A_{\ell}^m(\epsilon^{\alpha,1})$ podem ser escritos como:

$$A_{\ell}^m(\epsilon^{\alpha,1}) = A_{\ell}^{m(0)} + \epsilon^{\alpha,1} A_{\ell}^{m(1)} + (\epsilon^{\alpha,1})^2 A_{\ell}^{m(2)} \quad (\text{III-17})$$

Atribuindo um valor para $\epsilon^{\alpha,1}$, podemos encontrar $A_{\ell}^{m(1)}$ e $A_{\ell}^{m(2)}$ com técnicas usuais de ajuste. Embora nenhum resultado quantitativo possa ser obtido desta forma, podemos identificar quais os $A_{\ell}^{m(i=1,2)}$, coeficientes de todas as componentes de $\vec{\epsilon}$ e dos produtos destas, diferem de zero. A forma do potencial assim calculado, coincide com a encontrada por Kale et al.⁵¹ usando teoria de grupos. Para escrever a forma do potencial, vamos separá-lo em várias parcelas, para clarear a sua origem:

$$V = V_0 + r^2 V_1^{(2)} + r^4 V_1^{(4)} + r^6 V_1^{(6)} + r^2 V_2^{(2)} + r^4 V_2^{(4)} + r^6 V_2^{(6)} \quad (\text{III-18})$$

onde V_0 é o potencial da rede não deformada (eq.(III-15)) e V_1 e V_2 são respectivamente os potenciais de 1ª e 2ª ordem nas deformações. O sobreíndice (ℓ) indica a ordem dos operadores de momento angular que são considerados no termo.

Separando as componentes de $\vec{\epsilon}$ em componentes simétricas (ϵ) e antissimétricas (ω),

$$e^{\alpha,1} = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}$$

$$e^{\alpha,2} = 2\epsilon_{33} - \epsilon_{11} - \epsilon_{22}$$

$$e_1^Y = \epsilon_{11} - \epsilon_{22}$$

$$e_2^Y = \epsilon_{12} + \epsilon_{21}$$

$$e_1^\epsilon = \epsilon_{23} + \epsilon_{32}$$

$$e_2^\epsilon = \epsilon_{13} + \epsilon_{31}$$

(III-19)

$$\omega_0^Y = (1/2) (\epsilon_{12} - \epsilon_{21})$$

$$\omega_1^\epsilon = (1/2) (\epsilon_{23} - \epsilon_{32})$$

$$\omega_2^\epsilon = (1/2) (\epsilon_{13} - \epsilon_{31})$$

podemos escrever $V_1^\ell (\ell=2,4,6)$ e $V_2^\ell (\ell=2)$ como:

$$V_1^{(2)} = (A_1^{\alpha,2} e^{\alpha,1} + A_2^{\alpha,2} e^{\alpha,2}) Y_2^0(\theta, \phi)$$

$$+ A_1^{Y,2} [e_1^Y Y_{22}^+(\theta, \phi) + e_2^Y Y_{22}^-(\theta, \phi)]$$

$$+ A_1^{\epsilon,2} [e_1^\epsilon Y_{21}^-(\theta, \phi) + e_2^\epsilon Y_{21}^+(\theta, \phi)]$$

$$+ \sqrt{6} A_2^0 [\omega_1^\epsilon Y_{21}^-(\theta, \phi) + \omega_2^\epsilon Y_{21}^+(\theta, \phi)]$$

(III-20)

$$V_1^{(4)} = (A_1^{\alpha,4} e^{\alpha,1} + A_2^{\alpha,4} e^{\alpha,2}) Y_2^0(\theta, \phi)$$

$$+ A_1^{Y,4} [e_1^Y Y_{42}^+(\theta, \phi) + e_2^Y Y_{42}^-(\theta, \phi)]$$

$$+ A_2^{Y,4} [e_1^Y Y_{44}^+(\theta, \phi) - e_2^Y Y_{44}^-(\theta, \phi)]$$

$$+ A^{\epsilon,4} [e_1^\epsilon Y_{41}^+(\theta, \phi) + e_2^\epsilon Y_{41}^-(\theta, \phi)]$$

$$+ \sqrt{20} A_4^0 [\omega_1^\epsilon Y_{41}^-(\theta, \phi) + \omega_2^\epsilon Y_{41}^+(\theta, \phi)]$$

(III-21)

$$\begin{aligned}
V_1^{(6)} = & (A_1^{\alpha,6} e^{\alpha,1} + A_2^{\alpha,6} e^{\alpha,2}) Y_6^0(\theta, \phi) \\
& + A_1^{\gamma,6} [e_1^{\gamma} Y_{62}^+(\theta, \phi) + e_2^{\gamma} Y_{62}^-(\theta, \phi)] \\
& + A_2^{\gamma,6} [e_1^{\gamma} Y_{62}^-(\theta, \phi) - e_2^{\gamma} Y_{62}^+(\theta, \phi)] \\
& + A_1^{\epsilon,6} [e_1^{\epsilon} Y_{61}^-(\theta, \phi) + e_2^{\epsilon} Y_{61}^+(\theta, \phi)] \\
& + A_2^{\epsilon,6} [e_1^{\epsilon} Y_{65}^-(\theta, \phi) + e_2^{\epsilon} Y_{65}^+(\theta, \phi)] \\
& + \sqrt{3} A_6^6 [\omega_1^{\epsilon} Y_{65}^-(\theta, \phi) - \omega_2^{\epsilon} Y_{65}^+(\theta, \phi)] \\
& + \sqrt{42} A_6^0 [\omega_1^{\epsilon} Y_{61}^-(\theta, \phi) + \omega_2^{\epsilon} Y_{61}^+(\theta, \phi)] \\
& - 6 A_6^6 \omega_0 Y_{66}^-(\theta, \phi)
\end{aligned} \tag{III-22}$$

$$\begin{aligned}
V_2^{(2)} = & [A_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1}(e^{\alpha,1})^2 + A_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2}e^{\alpha,1}e^{\alpha,2} + A_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2}(e^{\alpha,2})^2]Y_2^0(\theta,\phi) \\
& + A_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma}[(e_1^\gamma)^2 + (e_2^\gamma)^2]Y_2^0(\theta,\phi) \\
& + A_{\alpha,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_1}[(e_1^\varepsilon)^2 + (e_2^\varepsilon)^2]Y_2^0(\theta,\phi) \\
& + A_{\alpha,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_2}(e_2^\varepsilon\omega_2^\varepsilon + e_1^\varepsilon\omega_1^\varepsilon)Y_2^0(\theta,\phi) + A_{\alpha,2}^{\varepsilon_2,\varepsilon_2}[(\omega_1^\varepsilon)^2 + (\omega_2^\varepsilon)^2]Y_2^0(\theta,\phi) \\
& + A_{\alpha,2}^{\omega,\omega}(\omega_0^\gamma)^2Y_2^0(\theta,\phi) \\
& + A_{\gamma,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_1}\{[(e_2^\varepsilon)^2 - (e_1^\varepsilon)^2]Y_{22}^+(\theta,\phi) + 2e_1^\varepsilon e_2^\varepsilon Y_{22}^-(\theta,\phi)\} \\
& + A_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma}\{[(e_1^\gamma)^2 + (e_2^\gamma)^2]Y_{22}^+(\theta,\phi) + 2e_1^\gamma e_2^\gamma Y_{22}^-(\theta,\phi)\} \\
& + (A_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\alpha_1}e^{\alpha,1} + A_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\alpha_2}e^{\alpha,2})[e_1^\varepsilon Y_{21}^-(\theta,\phi) + e_2^\varepsilon Y_{21}^+(\theta,\phi)] \\
& + (A_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1}e^{\alpha,1} + A_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2}e^{\alpha,2})[e_1^\gamma Y_{22}^+(\theta,\phi) + e_2^\gamma Y_{22}^-(\theta,\phi)] \\
& + A_{\varepsilon,2}^{\gamma,\varepsilon_1}[(e_2^\gamma\omega_2^\varepsilon - e_1^\gamma\omega_1^\varepsilon)Y_{21}^-(\theta,\phi) + (e_2^\gamma\omega_1^\varepsilon + e_1^\gamma\omega_2^\varepsilon)Y_{21}^+(\theta,\phi)] \\
& + (A_{\varepsilon,2}^{\varepsilon',\alpha_1}e^{\alpha,1} + A_{\varepsilon,2}^{\varepsilon',\alpha_2}e^{\alpha,2})[\omega_1^\varepsilon Y_{21}^-(\theta,\phi) + \omega_2^\varepsilon Y_{21}^+(\theta,\phi)] \\
& + A_{\gamma,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_2}[(e_2^\varepsilon\omega_2^\varepsilon - e_1^\varepsilon\omega_1^\varepsilon)Y_{22}^+(\theta,\phi) + (e_2^\varepsilon\omega_1^\varepsilon + e_1^\varepsilon\omega_2^\varepsilon)Y_{22}^-(\theta,\phi)] \\
& + A_{\varepsilon,2}^{\gamma,\varepsilon_2}[(e_1^\gamma\omega_1^\varepsilon - e_2^\gamma\omega_2^\varepsilon)Y_{21}^-(\theta,\phi) + (e_2^\gamma\omega_1^\varepsilon + e_1^\gamma\omega_2^\varepsilon)Y_{21}^+(\theta,\phi)] \\
& + A_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\omega}\{\omega_0^\gamma[e_1^\varepsilon Y_{21}^+(\theta,\phi) - e_2^\varepsilon Y_{21}^-(\theta,\phi)]\} \\
& + A_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}\{\omega_0^\gamma[e_1^\gamma Y_{22}^-(\theta,\phi) - e_2^\gamma Y_{22}^+(\theta,\phi)]\} \\
& + A_{\gamma,2}^{\varepsilon_2,\varepsilon_2}\{[(\omega_2^\varepsilon)^2 - (\omega_1^\varepsilon)^2]Y_{22}^+(\theta,\phi) + 2\omega_1^\varepsilon\omega_2^\varepsilon Y_{22}^-(\theta,\phi)\} \\
& + A_{\varepsilon,2}^{\omega,\varepsilon_2}\{\omega_0^\gamma[\omega_1^\varepsilon Y_{21}^+(\theta,\phi) - \omega_2^\varepsilon Y_{21}^-(\theta,\phi)]\}
\end{aligned} \tag{III-23}$$

Vamos omitir $V_2^{(4)}$ e $V_2^{(6)}$ para evitar uma complexidade ainda maior. Também, estes termos devem dar contribuições menores para o potencial da eq.(III-18) do que $V_1^{(2)}$, $V_1^{(4)}$, $V_1^{(6)}$ e $V_2^{(2)}$. Nas eqs.(III-20,21,22,23), usamos as convenções

$$Y_{\ell m}^+(\theta,\phi) = \frac{(-1)^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta,\phi) + Y_{\ell}^{-m}(\theta,\phi)}{2};$$

$$Y_{\ell m}^{-}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) - Y_{\ell}^{-m}(\theta, \phi)}{2i} \quad (\text{III-24})$$

O potencial da eq.(III-18) é também escalar e portanto invariante frente a rotações, o que mostra que não há necessidade de invocar o uso do tensor das deformações finitas, como feito por Southern e Goodings³⁹, Melcher⁵², Bonsall e Melcher⁵³ e Dohm e Fulde⁵⁴, para obter a dependência do campo cristalino com as deformações rotacionais.

Neste ponto, é importante deixar claro a diferença entre o enfoque deste trabalho, escrevendo o potencial eletrostático como função das componentes do tensor das deformações infinitesimais, e o de outros autores^{39,52,53,54}, para incluir no campo cristalino a dependência nos termos rotacionais. O uso do tensor das deformações finitas, definido como um tensor simétrico cujas componentes levam a uma deformação real do meio, vem da observação de que em um cristal não magnético, a energia associada com uma deformação seria independente das suas características rotacionais⁵⁵. As componentes do tensor das deformações finitas (\vec{E}) são definidas em termos das componentes de \vec{e} como^{39,53}:

$$E_{ij} = (1/2)(\epsilon_{ij} + \epsilon_{ji}) + (1/2) \sum_{\lambda=1}^3 \epsilon_{\lambda i} \epsilon_{\lambda j} \quad (\text{III-25})$$

e a energia associada com as deformações grandes da rede pode ser escrita como:

$$F_{el} = F_{el}^{(0)} + F_{el}^{(1)} + (1/2) \sum_{\substack{i,j,k \\ l=1}}^3 C_{ijkl} E_{ij} E_{kl} + (1/6) \sum_{\substack{i,j,k,l \\ m,n=1}}^3 C_{ijklmn} E_{ij} E_{kl} E_{mn} + \dots \quad (\text{III-26})$$

onde os C_{ijkl} e os C_{ijklmn} são respectivamente as constantes elásticas de 2ª e 3ª ordem. Para ver a diferença entre as constantes elásticas obtidas pela energia elástica construída com o tensor \vec{E} ou com o tensor \vec{e} , vamos usar $F_{el}(\vec{E})$ da eq.(III-26) e calcular

as derivadas relativas as componentes de $\vec{\epsilon}$:

$$\frac{\partial F_{el}}{\partial \epsilon_{ij}} = \frac{\partial F_{el}}{\partial E_{ij}} \frac{\partial E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij}} = \frac{\partial F_{el}}{\partial E_{ij}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{ii} \right) \quad (\text{III-27})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} &= \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \frac{\partial E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij}} \frac{\partial E_{kl}}{\partial \epsilon_{kl}} + \frac{\partial F_{el}}{\partial E_{ij}} \frac{\partial^2 E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \\ &= \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{ii} \right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{kk} \right) + \frac{\partial F_{el}}{\partial E_{ij}} \delta_{ij} \delta_{kl} \end{aligned} \quad (\text{III-28})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 F_{el}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl} \partial \epsilon_{mn}} &= \frac{\partial^3 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl} \partial E_{mn}} \frac{\partial E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij}} \frac{\partial E_{kl}}{\partial \epsilon_{kl}} \frac{\partial E_{mn}}{\partial \epsilon_{mn}} \\ &+ \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \left(\frac{\partial^2 E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{mn}} \frac{\partial E_{kl}}{\partial \epsilon_{kl}} + \frac{\partial^2 E_{kl}}{\partial \epsilon_{kl} \partial \epsilon_{mn}} \frac{\partial E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij}} \right) \\ &+ \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{mn}} \frac{\partial^2 E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \frac{\partial E_{mn}}{\partial \epsilon_{mn}} + \frac{\partial F_{el}}{\partial E_{ij}} \frac{\partial^3 E_{ij}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl} \partial \epsilon_{mn}} \\ &= \frac{\partial^3 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl} \partial E_{mn}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{ii} \right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{kk} \right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{mm} \right) \\ &+ \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \left[\delta_{ij} \delta_{mn} \delta_{im} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{kk} \right) + \delta_{kl} \delta_{mn} \delta_{km} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{ii} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{mn}} \left[\delta_{ij} \delta_{mn} \delta_{im} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \epsilon_{mm} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{III-29})$$

As constantes elásticas de 2ª ordem podem ser expressas de duas formas alternativas:

$$C_{ijkl} = \lim_{\vec{\epsilon} \rightarrow 0} \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \quad (\text{III-30})$$

ou

$$C'_{ijkl} = \lim_{\vec{\epsilon} \rightarrow 0} \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \quad (\text{III-31})$$

A eq.(III-28) mostra que estas definições só podem ser consideradas equivalentes, quando $F_{el}^{(1)}=0$, o que implica em que

$$\lim_{\vec{\epsilon} \rightarrow 0} \frac{\partial F_{el}}{\partial E_{ij}} = 0 \quad (\text{III-32})$$

Da mesma forma, as constantes elásticas de 3ª ordem ser expressas como:

$$C_{ijklmn} = \lim_{\vec{E} \rightarrow 0} \frac{\partial^3 F_{el}}{\partial E_{ij} \partial E_{kl} \partial E_{mn}} \quad (\text{III-33})$$

ou

$$C'_{ijklmn} = \lim_{\vec{\epsilon} \rightarrow 0} \frac{\partial^3 F_{el}}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl} \partial \epsilon_{mn}} \quad (\text{III-34})$$

A eq.(III-29) mostra que em geral $C_{ijklmn} \neq C'_{ijklmn}$, o que só não ocorre nos casos em que valem pelo menos duas das tres seguintes desigualdades: $i \neq j$, $k \neq l$, $m \neq n$. Vemos agora que as definições de constantes elásticas diferem quando usamos $F_{el}(\vec{E})$ ou $F_{el}(\vec{\epsilon})$, mas uma vez que pode ser estabelecida uma relação entre os C e os C', não é fundamental expressar F_{el} como função de \vec{E} ou $\vec{\epsilon}$, uma vez que fique claro que forma foi usada. Mas, o uso de \vec{E} no cálculo de F_{el} e posterior derivação relativa as componentes de $\vec{\epsilon}$ para encontrar as constantes elásticas, como feito por Southern e Goodings³⁹ e Bonsall e Melcher⁵³, é claramente inadequado. Por exemplo, escrevendo F_{el} como

$$F_{el} = \sum_{i,j=1}^3 B_{ij} E_{ij} = \sum_{i,j=1}^3 B_{ij} \left[\frac{1}{2}(\epsilon_{ij} + \epsilon_{ji}) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^3 \epsilon_{\lambda i} \epsilon_{\lambda j} \right] \quad (\text{III-35})$$

e definindo C_{ii} como

$$C_{ii} = \lim_{\vec{\epsilon} \rightarrow 0} \frac{\partial^2 F_{el}}{\partial \epsilon_{ii}^2} \quad (\text{III-36})$$

fica claro que C_{ii} não é uma constante elástica de 2ª ordem.

III.3 - A Hamiltoniana do Modelo -

A hamiltoniana que descreve os íons trivalentes positivos na rede cristalina é:

$$H = H_z + H_{tr}^{is} + H_{tr}^{an} + H_{an} + H_{el} + \bar{H}_{me}^I + \bar{H}_{me}^{II} \quad (III-37)$$

H_z é a interação de Zeeman; H_{tr}^{is} e H_{tr}^{an} são respectivamente as interações de troca isotrópica e anisotrópica; H_{an} é a interação de campo cristalino de ordem zero, ou de anisotropia; e H_{el} é um termo clássico adicionado, representando a energia elástica do sistema. \bar{H}_{me}^I e \bar{H}_{me}^{II} são, respectivamente, as interações magnetoelásticas estáticas de 1 e 2 íons.

A interação de Zeeman é a usual e descreve a interação dos vários momentos magnéticos iônicos com o campo magnético externo aplicado (\vec{H}_{ext}), e tem a forma:

$$H_z = - \sum_i^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}_{ext} = g\mu_B \sum_i^N \vec{H}_{ext} \cdot \vec{J}_i = Ng\mu_B \vec{H}_{ext} \cdot \vec{J} \quad (III-38)$$

onde $\vec{\mu}_i$ e \vec{J}_i são, respectivamente, o momento magnético e o momento angular total do íon i , g é o fator de Landé, N é o número total de íons e \vec{J} o momento angular total iônico, considerando a equivalência de todos os íons.

A interação de troca isotrópica se dá principalmente por um mecanismo indireto em que os elétrons livres são polarizados pelos elétrons 4f e a veiculam⁵⁶⁻⁵⁸. Esta interação é oscilatória de longo alcance e pode ser escrita na mesma forma que a interação de troca de Heisemberg:

$$H_{tr}^{is} = -N \sum_{i \neq j}^N J_{ij} \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j \quad (III-39)$$

\vec{J}_i e \vec{J}_j são os momentos angulares totais dos íons i e j , respectivamente; J_{ij} é um parâmetro de acoplamento, oscilatório ao longo

de distâncias interatômicas, que no modelo de elétrons livres pode ser escrito como⁵⁹:

$$J_{ij} = J_{tr}(R_{ij}) = \frac{3zJ^2\pi}{2\epsilon_F} \phi(2k_F R_{ij}) \quad (\text{III-40})$$

onde

$$\phi(Y) = (Y\cos Y - \text{sen} Y)/Y^4 \quad (\text{III-41})$$

R_{ij} é a distância entre os íons i e j , z é o número de elétrons de condução por átomo; ϵ_F e k_F são, respectivamente, a energia de Fermi e o vetor de onda correspondente, e J é a constante de interação de troca s-f. As superfícies de Fermi das várias terras raras são difíceis de calcular e é muito difícil obter uma estimativa realista da interação de troca. Neste trabalho, nós tratamos esta interação com o modelo de campo molecular de Weiss.

No tratamento de campo molecular, a interação de troca entre os momentos magnéticos iônicos é simulada por uma interação média de todos os íons com um campo magnético fictício, chamado de campo molecular (\vec{H}_{cm}), e é esperado que este tratamento só de bons resultados nas temperaturas em que a interação de troca entre os momentos não é muito forte.

Em materiais paramagnéticos ou com ordenamento ferromagnético simples, \vec{H}_{cm} é função linear da magnetização e pode ser escrito como:

$$\vec{H}_{cm} = \Gamma \vec{\sigma} = \frac{\langle J \rangle \sum_j^N J_{ij}}{g\mu_B} \quad (\text{III-42})$$

onde

$$\Gamma = -(J \sum_j^N J_{ij})/g\mu_B \quad (\text{III-43})$$

é a constante de Weiss de campo molecular e $\vec{\sigma}$ é a magnetização reduzida. A hamiltoniana de troca isotrópica pode ser escrita na mesma forma que a de Zeeman:

$$H_{tr}^{is,cm} = g\mu_B \sum_i^N \vec{H}_{cm}(i) \cdot \vec{J}_i = Ng\mu_B \Gamma \vec{\sigma} \cdot \vec{J} \quad (III-44)$$

Embora não tenhamos feito uso da hamiltoniana de troca anisotrópica na análise dos resultados experimentais, uma vez que ela é desprezível em temperaturas maiores do que 150 K^{60,61} e nós aplicamos a análise apenas a região paramagnética (T>230 K), incluímos um termo responsável por esta interação na hamiltoniana da eq.(III-37). A forma adotada foi a comumente usada na descrição de anisotropias uniaxiais de 2ª ordem:

$$H_{tr}^{an} = - \sum_i^N \sum_{j \neq i} K_{ij} (3J_{iz}J_{jz} - \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j) \quad (III-45)$$

onde os K_{ij} são as constantes de anisotropia da interação de troca e J_{iz} é a componente de \vec{J}_i na direção z. Na aproximação de campo molecular $H_{tr}^{an,cm}$ fica:

$$H_{tr}^{an,cm} = Ng\mu_B \Gamma_1 (3\sigma_z J_{iz} - \vec{\sigma} \cdot \vec{J}_i) \quad (III-46)$$

onde Γ_1 é a constante de campo molecular de anisotropia.

A hamiltoniana de anisotropia (H_{an}) representa a interação de campo cristalino de ordem zero (eq.(III-15)), isto é, a parte independente das deformações. Para calcular a energia de anisotropia devemos encontrar os elementos de matriz de $V(\vec{r})$. A parte radial pode ser calculada facilmente, mas para encontrar a parte angular, as autofunções na representação $|LSJM_J\rangle$ devem ser conhecidas em função dos autoestados eletrônicos $|l m_l j m_j\rangle$. Isto é muito difícil de fazer para uma configuração $4f^8$, exceto pelo uso de uma alternativa⁶² usando o teorema de Wigner-Eckart. Por este teorema, os elementos de matriz dos harmônicos esféricos podem ser substituídos pelos dos operadores tensoriais esféricos irredutíveis de momento angular, multiplicados por fatores que são razões entre os elementos de matriz reduzidos. Estes operadores são

escritos em termos das componentes do momento angular total \vec{J} e seus elementos de matriz são fáceis de calcular na representação $|\text{LSJM}_J\rangle$. A hamiltoniana de anisotropia derivada da eq.(III-15) pode ser escrita como:

$$H_{\text{an}}(i) = \sum_{\ell, m} P_{\ell}^m Q_{\ell}^m(\vec{J})$$

$$= P_2^0 Q_2^0(\vec{J}) + P_4^0 Q_4^0(\vec{J}) + P_6^0 Q_6^0(\vec{J}) + P_6^6 Q_{66}^+(\vec{J}) \quad (\text{III-47})$$

onde os P_{ℓ}^m são constantes fenomenológicas compostas dos A_{ℓ}^m efetivos da eq.(III-15), isto é, considerando a blindagem parcial e incluindo as funções radiais. Os $Q_{\ell}^m(\vec{J})$ são os operadores tensoriais, definidos por:

$$Q_{\ell}^{\pm \ell}(\vec{J}) = (\mp 1)^{\ell} (J_{\pm})^{\ell} \quad (\text{III-48})$$

$$[J_{\pm}, Q_{\ell}^m(\vec{J})] = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)} Q_{\ell}^{m\pm 1}(\vec{J}) \quad (\text{III-49})$$

As convenções $Q_{\ell m}^{\pm}(\vec{J})$ representam:

$$Q_{\ell m}^{+}(\vec{J}) = [(-1)^{\ell} Q_{\ell}^m(\vec{J}) + Q_{\ell}^{-m}(\vec{J})] / 2 \quad (\text{III-50})$$

$$Q_{\ell m}^{-}(\vec{J}) = [(-1)^{\ell} Q_{\ell}^m(\vec{J}) - Q_{\ell}^{-m}(\vec{J})] / 2i \quad (\text{III-51})$$

Os operadores $Q_{\ell}^m(\vec{J})$ são discutidos no apêndice B.

A interação magnetoelástica de 1 íon $(\bar{H}_{\text{me}}^{\text{I}})^*$ é devida a dependência da interação de campo cristalino com as deformações da rede. A interação magnetoelástica de 2 íons $(\bar{H}_{\text{me}}^{\text{II}})^*$ é devida a dependência da interação de troca com as deformações. Inicialmente, va
*A barra é usada em $\bar{H}_{\text{me}}^{\text{I}}$ e $\bar{H}_{\text{me}}^{\text{II}}$ para indicar interações magnetoelásticas estáticas, isto é, sem a presença de deformações dependentes do tempo. Isto é para diferenciar das interações magnetoelásticas dinâmicas, como ocorre com a presença de ultrassom no cristal.

mos escrever estes termos até 1ª ordem nas deformações. $\bar{H}_{me}^{I,1}$ pode ser derivado das eqs.(III-20,21,22) como

$$\begin{aligned}
 \bar{H}_{me}^{I,1}(i) = & -(B_1^{\alpha,2} e^{\alpha,1} + B_2^{\alpha,2} e^{\alpha,2}) Q_2^0(\vec{J}) - B^{\gamma,2} (e_1^{\gamma} Q_{22}^+(\vec{J}) + e_2^{\gamma} Q_{22}^-(\vec{J})) \\
 & - B^{\epsilon,2} (e_1^{\epsilon} Q_{21}^-(\vec{J}) + e_2^{\epsilon} Q_{21}^+(\vec{J})) + \sqrt{6} P_2^0 (\omega_1^{\epsilon} Q_{21}^-(\vec{J}) + \omega_2^{\epsilon} Q_{21}^+(\vec{J})) \\
 & - (B_1^{\alpha,4} e^{\alpha,1} + B_2^{\alpha,4} e^{\alpha,2}) Q_4^0(\vec{J}) - B_1^{\gamma,4} (e_1^{\gamma} Q_{42}^+(\vec{J}) + e_2^{\gamma} Q_{42}^-(\vec{J})) \\
 & - B_2^{\gamma,4} (e_1^{\gamma} Q_{44}^+(\vec{J}) - e_2^{\gamma} Q_{44}^-(\vec{J})) - B^{\epsilon,4} (e_1^{\epsilon} Q_{41}^-(\vec{J}) + e_2^{\epsilon} Q_{41}^+(\vec{J})) \\
 & + \sqrt{20} P_4^0 (\omega_1^{\epsilon} Q_{41}^-(\vec{J}) + \omega_2^{\epsilon} Q_{41}^+(\vec{J})) - (B_1^{\alpha,6} e^{\alpha,1} + B_2^{\alpha,6} e^{\alpha,2}) Q_6^0(\vec{J}) \\
 & - B_1^{\gamma,6} (e_1^{\gamma} Q_{62}^+(\vec{J}) + e_2^{\gamma} Q_{62}^-(\vec{J})) - B_2^{\gamma,6} (e_1^{\gamma} Q_{64}^+(\vec{J}) - e_2^{\gamma} Q_{64}^-(\vec{J})) \\
 & - B_1^{\epsilon,6} (e_1^{\epsilon} Q_{61}^-(\vec{J}) + e_2^{\epsilon} Q_{61}^+(\vec{J})) - B_2^{\epsilon,6} (e_1^{\epsilon} Q_{65}^-(\vec{J}) - e_2^{\epsilon} Q_{65}^+(\vec{J})) \\
 & + \sqrt{42} P_6^0 (\omega_1^{\epsilon} Q_{61}^-(\vec{J}) + \omega_2^{\epsilon} Q_{61}^+(\vec{J})) + \sqrt{3} P_6^6 (\omega_1^{\epsilon} Q_{65}^-(\vec{J}) - \omega_2^{\epsilon} Q_{65}^+(\vec{J})) \\
 & - 6 P_6^6 \omega_0^{\gamma} Q_{66}^-(\vec{J}) \quad \text{(III-52)}
 \end{aligned}$$

onde os $B_i^{\Gamma,j}$ são as constantes magnetoelásticas de 1 íon. A forma da hamiltoniana magnetoelástica de 2 íons é similar a de 1 íon, onde os operadores tensoriais são substituídos por produtos de operadores de momento angular. Tratando esta interação até 2ª ordem nos operadores de momento angular, temos:

$$\begin{aligned}
 \bar{H}_{me}^{II,1}(i) = & - \sum_j (D_{1ij}^{\alpha,0} e^{\alpha,1} + D_{2ij}^{\alpha,0} e^{\alpha,2}) \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j \\
 & - \sum_j (D_{1ij}^{\alpha,2} e^{\alpha,1} + D_{2ij}^{\alpha,2} e^{\alpha,2}) (3J_{iz} - \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j) \\
 & - \sum_j D_{ij}^{\gamma,2} [e_1^{\gamma} (J_{ix} J_{jx} - J_{iy} J_{jy}) + e_2^{\gamma} (J_{ix} J_{jy} - J_{iy} J_{jx})] \\
 & - \sum_j D_{ij}^{\epsilon,2} [e_1^{\epsilon} (J_{iy} J_{jz} - J_{iz} J_{jy}) + e_2^{\epsilon} (J_{ix} J_{jz} + J_{iz} J_{jx})] \quad \text{(III-53)}
 \end{aligned}$$

Tratando esta interação com a aproximação de campo molecular, temos:

$$\begin{aligned}
 \Pi_{me}^{II,1}(i) = & J(G_1^{\alpha,0} e^{\alpha,1} + G_2^{\alpha,0} e^{\alpha,2}) \vec{\sigma} \cdot \vec{J}_i \\
 & + J(G_1^{\alpha,2} e^{\alpha,1} + G_2^{\alpha,2} e^{\alpha,2}) (3\sigma_z J_{iz} - \vec{\sigma} \cdot \vec{J}_i) \\
 & + JG^{\gamma,2} [e_1^{\gamma} (\sigma_x J_{ix} - \sigma_y J_{iy}) + e_2^{\gamma} (\sigma_y J_{ix} + \sigma_x J_{iy})] \\
 & + JG^{\epsilon,2} [e_1^{\epsilon} (\sigma_z J_{iy} + \sigma_y J_{iz}) + e_2^{\epsilon} (\sigma_z J_{ix} + \sigma_x J_{iz})] \quad (III-54)
 \end{aligned}$$

onde os $G_i^{\Gamma,j}$, ou os $D_{ij}^{\Gamma,k}$, são constantes magnetoelásticas de 2 íons. Na aproximação de campo molecular

$$\begin{aligned}
 \sum_j D_{ij} \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j &= \vec{J}_i \cdot \sum_j D_{ij} \langle \vec{J}_j \rangle = \vec{J}_i \sum_j D_{ij} (-\vec{\sigma}/J) \\
 &= (-\vec{J}_i \cdot \vec{\sigma}/J) \sum_j D_{ij}^{\Gamma} = JG_i^{\Gamma,j} \vec{\sigma} \cdot \vec{J}_i \quad (III-55)
 \end{aligned}$$

onde

$$G_i^{\Gamma,j} = (\sum_j D_{ij}^{\Gamma})/J^2 \quad (III-56)$$

A forma da hamiltoniana magnetoelástica de 1 íon, de 2ª ordem nas deformações, incluindo apenas termos com operadores tensoriais até $\ell=2$, pode ser obtida da eq.(III-23) como

$$\begin{aligned}
 \Pi_{me}^{I,2}(i) = & \Pi_{me,\ell=2}^{I,2}(i) = \\
 & [B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1} (e^{\alpha,1})^2 + B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2} e^{\alpha,1} e^{\alpha,2} + B_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2} (e^{\alpha,2})^2] Q_2^0(\vec{J}) \\
 & + B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} [(e_1^{\gamma})^2 + (e_2^{\gamma})^2] Q_2^0(\vec{J}) + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} [(e_1^{\epsilon})^2 + (e_2^{\epsilon})^2] Q_2^0(\vec{J}) \\
 & + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} (e_2^{\epsilon} \omega_2^{\epsilon} + e_1^{\epsilon} \omega_1^{\epsilon}) Q_2^0(\vec{J}) + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2} [(\omega_1^{\epsilon})^2 + (\omega_2^{\epsilon})^2] Q_2^0(\vec{J}) \\
 & + B_{\alpha,2}^{\omega,\omega} (\omega_0^{\gamma})^2 Q_2^0(\vec{J}) \\
 & + B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} \{ [(e_2^{\epsilon})^2 - (e_1^{\epsilon})^2] Q_{22}^+(\vec{J}) + 2e_1^{\epsilon} e_2^{\epsilon} Q_{22}^-(\vec{J}) \} +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + B_{Y,2}^{Y,Y} \{ [(e_1^Y)^2 + (e_2^Y)^2] Q_{22}^+(\vec{J}) + 2e_1^Y e_2^Y Q_{22}^-(\vec{J}) \} \\
& + (B_{\epsilon,2}^{\epsilon,\alpha_1} e^{\alpha,1} + B_{\epsilon,2}^{\epsilon,\alpha_2} e^{\alpha,2}) (e_1^\epsilon Q_{21}^-(\vec{J}) + e_2^\epsilon Q_{21}^+(\vec{J})) \\
& + (B_{Y,2}^{Y,\alpha_1} e^{\alpha,1} + B_{Y,2}^{Y,\alpha_2} e^{\alpha,2}) (e_1^Y Q_{22}^+(\vec{J}) + e_2^Y Q_{22}^-(\vec{J})) \\
& + B_{\epsilon,2}^{Y,\epsilon_1} [(e_2^Y e_2^\epsilon - e_1^Y e_1^\epsilon) Q_{21}^-(\vec{J}) + (e_2^Y e_1^\epsilon + e_1^Y e_2^\epsilon) Q_{21}^+(\vec{J})] \\
& + (B_{\epsilon,2}^{\epsilon',\alpha_1} e^{\alpha,1} + B_{\epsilon,2}^{\epsilon',\alpha_2} e^{\alpha,2}) (\omega_1^\epsilon Q_{21}^-(\vec{J}) + \omega_2^\epsilon Q_{21}^+(\vec{J})) \\
& + B_{Y,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} [(e_2^\epsilon \omega_2^\epsilon - e_1^\epsilon \omega_1^\epsilon) Q_{22}^+(\vec{J}) + (e_2^\epsilon \omega_1^\epsilon + e_1^\epsilon \omega_2^\epsilon) Q_{22}^-(\vec{J})] \\
& + B_{\epsilon,2}^{Y,\epsilon_2} [(e_1^Y \omega_1^\epsilon - e_2^Y \omega_2^\epsilon) Q_{21}^-(\vec{J}) + (e_2^Y \omega_1^\epsilon + e_1^Y \omega_2^\epsilon) Q_{21}^+(\vec{J})] \\
& + B_{\epsilon,2}^{\epsilon,\omega} \omega_0^Y [(e_1^\epsilon Q_{21}^+(\vec{J}) - e_2^\epsilon Q_{21}^-(\vec{J}))] \\
& + B_{Y,2}^{Y,\omega} \omega_0^Y [(e_1^Y Q_{22}^-(\vec{J}) - e_2^Y Q_{22}^+(\vec{J}))] \\
& + B_{Y,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2} \{ [(\omega_2^\epsilon)^2 - (\omega_1^\epsilon)^2] Q_{22}^+(\vec{J}) + 2\omega_1^\epsilon \omega_2^\epsilon Q_{22}^-(\vec{J}) \} \\
& + B_{\epsilon,2}^{\omega,\epsilon_2} \omega_0^Y [(\omega_1^\epsilon Q_{21}^+(\vec{J}) - \omega_2^\epsilon Q_{21}^-(\vec{J}))]
\end{aligned} \tag{III-57}$$

onde os $B_{\Gamma_1,2}^{\Gamma_2,\Gamma_3}$ são constantes magnetoelásticas de 2ª ordem. Nós omitimos $\bar{H}_{me,\ell=4}^{I,2}$ e $\bar{H}_{me,\ell=6}^{I,2}$ na eq.(III-57) para evitar a introdução de um número ainda maior de constantes magnetoelásticas. Vamos também omitir $\bar{H}_{me}^{II,2}$.

Assumindo agora que todos os P_ℓ^m que aparecem na eq.(III-52) possam ser determinados através dos resultados experimentais de anisotropia, ela mostra que há 15 constantes de acoplamento

mento magnetoelástico de 1 íon, em 1ª ordem nas deformações, para ser determinadas. A inclusão da interação magnetoelástica de 2 íons, ainda em 1ª ordem nas deformações, e apenas de 2ª ordem nos operadores de momento angular, introduz mais 6 constantes de acoplamento. Introduzindo agora nas hamiltonianas magnetoelásticas de 1 e 2 íons os termos de 2ª ordem nas deformações, este número fica várias vezes aumentado. Neste ponto, é importante levantar a seguinte questão: com tantas constantes ajustáveis para descrever esta interação complexa, podemos ajustar os resultados experimentais com as predições teóricas, sem fugir a um significado físico aceitável? A resposta é muito provavelmente negativa, embora possa ser desenvolvida uma forma racional de verificar quais das constantes magnetoelásticas consideradas são mais efetivas. Considerando os trabalhos experimentais de magnetoestrição nas terras raras pesadas, um efeito de 1ª ordem nas deformações, vemos que quase todos os fenômenos podem ser explicados assumindo que as constantes magnetoelásticas dos termos em $\ell=2$ são mais importantes⁸. Apenas em Tb os termos em $\ell=4$ são relativamente importantes²⁵.

Vamos considerar uma situação em que arbitrariamente limitamos a nossa consideração aos termos de ordem $\ell=2$, embora ainda considerando os termos lineares e de 2ª ordem nas deformações. Neste caso ainda temos 4 constantes magnetoelásticas de 1 íon em 1ª ordem e 23 em 2ª ordem; 6 de 2 íons em 1ª ordem e mais de 30 em 2ª ordem. Mesmo com esta simplificação, a possibilidade de usar este modelo teórico para um ajuste dos resultados experimentais, de uma forma fisicamente significativa, é pequena. No entanto, nós vamos desenvolver um cálculo baseado neste modelo, na tentativa de explicar os resultados experimentais em termos das características físicas do modelo. Com estas limitações, não podemos esperar muito sucesso nesta tentativa; entretanto, veremos

que várias conclusões úteis e interessantes podem ser encontradas a partir daí.

III.4 - Aplicação do Modelo ao Cálculo das Constantes Elásticas -

Nós agora usamos a hamiltoniana do modelo com o propósito de calcular especificamente quantidades que possam ser usadas na comparação com medidas experimentais. A hamiltoniana contém um certo número de parâmetros que podem ser ajustados para reproduzir as propriedades específicas de cada uma das terras raras, medidas experimentalmente. Estas propriedades incluem a susceptibilidade magnética, as temperaturas de transição da região paramagnética, a energia de anisotropia e as deformações estáticas de origem magnetoestrutiva. Uma vez que estamos tratando a interação de troca com a aproximação de campo molecular, devemos esperar uma boa concordância entre a teoria e a experiência apenas na região paramagnética.

Para usar este modelo no cálculo de constantes elásticas de 2ª ordem, como medidas por técnicas de ultrassom, é importante incluir na hamiltoniana um termo dependente das deformações dinâmicas impostas no cristal. Isto é feito da seguinte maneira: a hamiltoniana da eq.(III-37) é tomada como hamiltoniana de ordem zero do sistema magnetoelástico:

$$H_0 = H_z + H_{tr}^{is} + H_{tr}^{an} + H_{an} + H_{el} + \bar{H}_{me}^I + \bar{H}_{me}^{II} \quad (III-58)$$

e a parte da hamiltoniana que é dependente das deformações dinâmicas é considerada como perturbação, sendo aqui tratada com teoria de perturbação de 2ª ordem. Assim,

$$H = H_0 + H_{me}^{rf} \quad (III-59)$$

Os autovalores e autovetores da hamiltoniana de ordem zero podem ser conhecidos através de

$$H_0 |m\rangle = E_m^{(0)} |m\rangle \quad (III-60)$$

onde os $|m\rangle$ são autoestados do sistema de spins. Uma vez que $J_{Tb}=6$, a eq.(III-60) fornece 13 autovalores e autovetores de H_0 . As correções de energia de 1ª e 2ª ordem podem ser obtidas usando a teoria de perturbações usual como:

$$E_m^{(1)} = \langle m | H_{me}^{rf} | m \rangle \quad (III-61)$$

e

$$E_m^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | H_{me}^{rf} | n \rangle \langle n | H_{me}^{rf} | m \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (III-62)$$

A energia livre de Helmholtz, de cada íon, pode agora ser obtida de sua definição termodinâmica como:

$$F = -kT \ln Z = -kT \ln \sum_{m=-J}^J e^{-E_m/kT} \quad (III-63)$$

onde

$$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + E_m^{(2)} \quad (III-64)$$

O conhecimento de F permite obter uma expressão para a dependência das constantes elásticas com a magnetização, através da eq.(III-6):

$$\begin{aligned} \Delta C_{ijkl}(\vec{\sigma}) &= C_{ijkl}(\vec{\sigma}) - C_{ijkl}(\vec{\sigma}_0) \\ &= \frac{\partial^2 F(\vec{\sigma})}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} - \frac{\partial^2 F(\vec{\sigma}_0)}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \end{aligned} \quad (III-65)$$

Na região paramagnética, $\vec{\sigma}_0$ é geralmente tomado como zero. A inclusão de \bar{H}_{me}^I e \bar{H}_{me}^{II} em H_0 vem do fato de que a magnetoestrição pode ser suficientemente grande nas terras raras para que sua contribuição para a energia livre possa ser apreciável. Se uma escolha adequada dos parâmetros que entram em H_0 for feita, ela pode ser diagonalizada exatamente, e propriedades como susceptibilidade magnética e deformações de equilíbrio podem ser obtidas teoricamente. O problema fica bastante simplificado se forem incluídos

apenas termos lineares nas deformações simétricas, até 2ª ordem nos operadores de momento angular, nas hamiltonianas magnetoelásticas que entram em H_0 . Com esta simplificação, os parâmetros de campo molecular (Γ e Γ_1), os de campo cristalino (P_2^0, P_4^0, P_6^0 e P_6^6) e os de acoplamento magnetoelástico linear ($4 B_1^{\Gamma,2}$ - eq.(III-52) e $6 G_1^{\Gamma,j}$ - eq.(III-54)), podem ser estimados, de modo a reproduzir da melhor forma os resultados experimentais de susceptibilidade e deformações de equilíbrio. Isto é feito em detalhes no capítulo V. Vamos agora discutir a forma de H_{me}^{rf} .

Vamos obter H_{me}^{rf} , negligenciando os termos de ordem superior a 2 nos operadores de momento angular. É claro que a forma de H_{me}^{rf} é a mesma da composição $\bar{H}_{me}^I + \bar{H}_{me}^{II}$. Condensadamente, ela pode ser escrita como:

$$H_{me}^{rf} = A Q_2^0(\vec{J}) + B Q_{22}^+(\vec{J}) + C Q_{22}^-(\vec{J}) + D Q_{21}^+(\vec{J}) + E Q_{21}^-(\vec{J}) \\ + P J \sigma_x J_x + Q J \sigma_z J_z \quad (III-66)$$

onde σ_x representa a componente da magnetização reduzida no plano basal, e σ_z na direção do eixo c. As variáveis A, B, C, D, E, P e Q englobam várias constantes magnetoelásticas e componentes do tensor das deformações:

$$A = -(B_1^{\alpha,2} e^{\alpha,1} + B_2^{\alpha,2} e^{\alpha,2}) + B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1} (e^{\alpha,1})^2 + B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2} e^{\alpha,1} e^{\alpha,2} \\ + B_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2} (e^{\alpha,2})^2 + B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} [(e_1^\gamma)^2 + (e_2^\gamma)^2] + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} [(e_1^\epsilon)^2 + (e_2^\epsilon)^2] \\ + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} [e_2^\epsilon \omega_2^\epsilon + e_1^\epsilon \omega_1^\epsilon] + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2} [(\omega_1^\epsilon)^2 + (\omega_2^\epsilon)^2] + B_{\alpha,2}^{\omega,\omega} (\omega_0^\gamma)^2 \quad (III-67)$$

$$\begin{aligned}
B = & -B^{\gamma,2}e_1^\gamma + B_{\gamma,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_1}[(e_2^\varepsilon)^2 - (e_1^\varepsilon)^2] + B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma}[(e_1^\gamma)^2 + (e_2^\gamma)^2] \\
& + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1}e_1^{\alpha,1}e_1^\gamma + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2}e_1^{\alpha,2}e_1^\gamma + B_{\gamma,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_2}(e_2^\varepsilon\omega_2^\varepsilon - e_1^\varepsilon\omega_1^\varepsilon) \\
& - B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}e_2^\gamma + B_{\gamma,2}^{\varepsilon_2,\varepsilon_2}[(\omega_2^\varepsilon)^2 - (\omega_1^\varepsilon)^2]
\end{aligned} \tag{III-68}$$

$$\begin{aligned}
C = & -B^{\gamma,2}e_2^\gamma + B_{\gamma,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_1}2e_1^\varepsilon e_2^\varepsilon + B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma}2e_1^\gamma e_2^\gamma + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1}e_1^{\alpha,1}e_2^\gamma \\
& + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2}e_1^{\alpha,2}e_2^\gamma - B_{\gamma,2}^{\varepsilon_1,\varepsilon_2}(e_2^\varepsilon\omega_1^\varepsilon + e_1^\varepsilon\omega_2^\varepsilon) + B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}e_1^\gamma \\
& + B_{\gamma,2}^{\varepsilon_2,\varepsilon_2}2\omega_1^\varepsilon\omega_2^\varepsilon
\end{aligned} \tag{III-69}$$

$$\begin{aligned}
D = & -B^{\varepsilon,2}e_2^\varepsilon + \sqrt{6}P_{2,2}^0\omega_2^\varepsilon + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\alpha_1}e_1^{\alpha,1}e_2^\varepsilon + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\alpha_2}e_1^{\alpha,2}e_2^\varepsilon \\
& + B_{\varepsilon,2}^{\gamma,\varepsilon_1}(e_2^\gamma e_1^\varepsilon + e_1^\gamma e_2^\varepsilon) + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon',\alpha_1}e_1^{\alpha,1}\omega_2^\varepsilon + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon',\alpha_2}e_1^{\alpha,2}\omega_2^\varepsilon \\
& + B_{\varepsilon,2}^{\gamma,\varepsilon_2}(e_2^\gamma\omega_1^\varepsilon + e_1^\gamma\omega_2^\varepsilon) + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\omega}e_1^\varepsilon + B_{\varepsilon,2}^{\omega,\varepsilon_2}e_1^\gamma\omega_1^\varepsilon
\end{aligned} \tag{III-70}$$

$$\begin{aligned}
E = & -B^{\varepsilon,2}e_1^\varepsilon + \sqrt{6}P_{2,1}^0\omega_1^\varepsilon + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\alpha_1}e_1^{\alpha,1}e_1^\varepsilon + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\alpha_2}e_1^{\alpha,2}e_1^\varepsilon \\
& + B_{\varepsilon,2}^{\gamma,\varepsilon_1}(e_2^\gamma e_2^\varepsilon - e_1^\gamma e_1^\varepsilon) + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon',\alpha_1}e_1^{\alpha,1}\omega_1^\varepsilon + B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon',\alpha_2}e_1^{\alpha,2}\omega_1^\varepsilon \\
& + B_{\varepsilon,2}^{\gamma,\varepsilon_2}(e_1^\gamma\omega_1^\varepsilon - e_2^\gamma\omega_2^\varepsilon) - B_{\varepsilon,2}^{\varepsilon,\omega}e_2^\varepsilon - B_{\varepsilon,2}^{\omega,\varepsilon_2}e_2^\gamma\omega_2^\varepsilon
\end{aligned} \tag{III-71}$$

$$\begin{aligned}
P = & [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2})e^{\alpha,1} + (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})e^{\alpha,2} + G^{\gamma,2}e_1^\gamma] \\
& + \text{termos de 2ª ordem nas deformações}
\end{aligned} \tag{III-72}$$

$$\begin{aligned}
Q = & [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2})e^{\alpha,1} + (G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})e^{\alpha,2}] \\
& + \text{termos de 2ª ordem nas deformações}
\end{aligned} \tag{III-73}$$

Agora, para calcular a contribuição magnetoelástica para uma constante elástica C_{ijkl} determinada, é necessário calcular a derivada segunda da energia livre relativamente as componentes de \vec{E} . Deve ser observado que algumas constantes elásticas transversais, normalmente equivalentes em um cristal não magnético, podem resultar diferentes nas terras raras. Por exemplo, veremos que $C_{1313}(\vec{\sigma})$ (medida com onda propagando ao longo do eixo c, polarizada no eixo a) e $C_{3131}(\vec{\sigma})$ (medida com onda propagando ao longo do eixo a, polarizada no eixo c) não são degeneradas quando um campo magnético é aplicado, e que a diferença é devida a contribuição dos termos rotacionais e das interações magnetoelásticas. Vamos então calcular a contribuição magnetoelástica para as constantes elásticas C_{1111}^* , C_{3333}^* , C_{1313}^* , C_{3131}^* , C_{1212} e C_{2121}^* , relembrando que em um cristal não magnético de estrutura hcp, $C_{1111}=C_{2222}$, $C_{1313}=C_{3131}$ e $C_{2121}=C_{1212}$. Apesar das negligências aos termos de ordem superior a 2 nos operadores de momento angular e a $\bar{H}_{me}^{II,2}$, nós esperamos que este tratamento seja válido na região paramagnética. Vamos considerar 3 casos, relativamente a direção de aplicação de campo magnético externo: $\vec{H} // \vec{a}$, $\vec{H} // \vec{b}$ e $\vec{H} // c$. Vamos ainda incluir neste cálculo a contribuição para as constantes elásticas de 2ª ordem devida a energia elástica de 3ª ordem, que pode ser grande, pois as deformações de origem magnetoestrutiva podem ser grandes.

Caso 1: $\vec{H} //$ eixo a - $\sigma_x \neq 0$; $\sigma_z = 0$

Como exemplo, vamos detalhar o cálculo de C_{1111} .

$$\begin{aligned} \Delta C_{1111} &= C_{1111}(\vec{\sigma}) - C_{1111}(0) \\ &= \frac{\partial^2 F(\vec{\sigma})}{\partial e_{11}^2} - \frac{\partial^2 F(0)}{\partial e_{11}^2} + \frac{\partial^2 F_{el}^{(3)}(\vec{\sigma})}{\partial e_{11}^2} - \frac{\partial^2 F_{el}^{(3)}(0)}{\partial e_{11}^2} \end{aligned} \quad (III-74)$$

*Constantes elásticas medidas experimentalmente neste trabalho.

Temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial e_{11}} = & \frac{\partial A}{\partial e_{11}} \frac{\partial}{\partial A} + \frac{\partial B}{\partial e_{11}} \frac{\partial}{\partial B} + \frac{\partial C}{\partial e_{11}} \frac{\partial}{\partial C} + \frac{\partial D}{\partial e_{11}} \frac{\partial}{\partial D} + \frac{\partial E}{\partial e_{11}} \frac{\partial}{\partial E} \\ & + \frac{\partial P}{\partial e_{11}} \frac{\partial}{\partial P} + \frac{\partial Q}{\partial e_{11}} \frac{\partial}{\partial Q} \end{aligned} \quad (\text{III-75})$$

e

$$\begin{aligned} (\partial^2/\partial e_{11}^2) = & (\partial^2 A/\partial e_{11}^2) (\partial/\partial A) + (\partial A/\partial e_{11})^2 (\partial^2/\partial A^2) \\ & + 2(\partial A/\partial e_{11}) [(\partial B/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial A \partial B) + (\partial C/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial A \partial C) \\ & + (\partial D/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial A \partial D) + (\partial E/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial A \partial E) + (\partial P/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial A \partial P) \\ & + (\partial Q/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial A \partial Q)] + (\partial^2 B/\partial e_{11}^2) (\partial/\partial B) \\ & + (\partial B/\partial e_{11})^2 (\partial^2/\partial B^2) + 2(\partial B/\partial e_{11}) [(\partial C/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial B \partial C) \\ & + (\partial D/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial B \partial D) + (\partial E/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial B \partial E) + (\partial P/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial B \partial P) \\ & + (\partial Q/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial B \partial Q)] + (\partial^2 C/\partial e_{11}^2) (\partial/\partial C) \\ & + (\partial C/\partial e_{11})^2 (\partial^2/\partial C^2) + 2(\partial C/\partial e_{11}) [(\partial D/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial C \partial D) \\ & + (\partial E/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial C \partial E) + (\partial P/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial C \partial P) + (\partial Q/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial C \partial Q)] \\ & + (\partial^2 D/\partial e_{11}^2) (\partial/\partial D) + (\partial D/\partial e_{11})^2 (\partial^2/\partial D^2) \\ & + 2(\partial D/\partial e_{11}) [(\partial E/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial D \partial E) + (\partial P/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial D \partial P) \\ & + (\partial Q/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial D \partial Q)] + (\partial^2 E/\partial e_{11}^2) (\partial/\partial E) \\ & + (\partial E/\partial e_{11})^2 (\partial^2/\partial E^2) + 2(\partial E/\partial e_{11}) [(\partial P/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial E \partial P) \\ & + (\partial Q/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial E \partial Q)] + (\partial^2 P/\partial e_{11}^2) (\partial/\partial P) \\ & + (\partial P/\partial e_{11})^2 (\partial^2/\partial P^2) + 2(\partial P/\partial e_{11}) (\partial Q/\partial e_{11}) (\partial^2/\partial P \partial Q) \\ & + (\partial^2 Q/\partial e_{11}^2) (\partial/\partial Q) + (\partial Q/\partial e_{11})^2 (\partial^2/\partial Q^2) \end{aligned} \quad (\text{III-76})$$

Usando as eqs.(III-7) que relacionam as constantes elásticas cartesianas com as irredutíveis, podemos calcular

$$\begin{aligned}
 (\partial A / \partial e_{11}) &= B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2} + 2B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1} e^{\alpha,1} - 2B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2} (e^{\alpha,2} - e^{\alpha,1}) \\
 &\quad + 2B_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2} e^{\alpha,2} + 2B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} e_1^\gamma \\
 (\partial^2 A / \partial e_{11}^2) &= 2B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1} - B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2} + 2B_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2} + 2B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} \\
 (\partial B / \partial e_{11}) &= -B^{\gamma,2} + 2B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} e_1^\gamma + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1} (e^{\alpha,1} + e_1^\gamma) + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2} (e^{\alpha,2} - e_1^\gamma) \\
 (\partial^2 B / \partial e_{11}^2) &= 2B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} + 2B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1} - 2B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2} \\
 (\partial C / \partial e_{11}) &= (\partial D / \partial e_{11}) = (\partial E / \partial e_{11}) = 0 \\
 (\partial^2 C / \partial e_{11}^2) &= (\partial^2 D / \partial e_{11}^2) = (\partial^2 E / \partial e_{11}^2) = 0 \\
 (\partial P / \partial e_{11}) &= [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^{\gamma,2}] \\
 (\partial Q / \partial e_{11}) &= [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})]
 \end{aligned}
 \tag{III-77}$$

Usando a expressão da energia elástica de 3ª ordem da eq.(III-11), calculamos:

$$\frac{\partial F_{el}^{(3)}}{\partial e_{11}^2} = C_{111111} e_{11} + C_{111122} e_{22} + C_{111133} e_{33}
 \tag{III-78}$$

e, desprezando os produtos entre constantes magnetoelásticas e deformações nas eqs.(III-77), obtemos, finalmente:*

*Por simplicidade, nós chamamos $(\partial^2 F(\vec{\sigma}) / \partial A^2) - (\partial^2 F(0) / \partial A^2)$ de $\partial^2 F / \partial A^2$. O mesmo ocorre com as outras derivadas de F. Também $e_{ii} = e_{ii}(\vec{\sigma}) - e_{ii}(0)$

$$\begin{aligned}
\Delta C_{1111} = & (B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) (\partial^2 F / \partial A^2) + (B^\gamma,2)^2 (\partial^2 F / \partial B^2) \\
& + [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^\gamma,2]^2 (\partial^2 F / \partial P^2) \\
& - 2B^\gamma,2 (B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) (\partial^2 F / \partial A \partial B) \\
& + 2(B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^\gamma,2] (\partial^2 F / \partial A \partial P) \\
& - 2B^\gamma,2 [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^\gamma,2] (\partial^2 F / \partial B \partial P) \\
& + 2(B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1} - B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2} + B_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2} + B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma}) (\partial F / \partial A) \\
& + 2(B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1} - B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2}) (\partial F / \partial B) \\
& + C_{111111} e_{11} + C_{111122} e_{22} + C_{111133} e_{33} \quad (III-79)
\end{aligned}$$

onde os termos derivados do coeficiente Q são desprezados, porque $\partial F / \partial Q$ depende linearmente de σ_z que é zero para \vec{H} / \vec{a} . Para C_{3333} , obtemos

$$\begin{aligned}
\Delta C_{3333} = & (B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2})^2 (\partial^2 F / \partial A^2) \\
& + [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})]^2 (\partial^2 F / \partial P^2) \\
& - 2(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})] (\partial^2 F / \partial A \partial P) \\
& + (2B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1} + 4B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2} + 8B_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2}) (\partial F / \partial A) \\
& + C_{113333} (e_{11} + e_{22}) + C_{333333} e_{33} \quad (III-80)
\end{aligned}$$

No cálculo da dependência das constantes elásticas transversais, devemos levar em conta que em geral, $\epsilon_{ij} \neq \epsilon_{ji}$. Por exemplo, para C_{1313} temos:

$$\Delta C_{1313} = \frac{\partial^2 F(\vec{\sigma})}{\partial \epsilon_{13}} - \frac{\partial^2 F(0)}{\partial \epsilon_{13}} + \frac{\partial^2 F_{el}^{(3)}(\vec{\sigma})}{\partial \epsilon_{13}} - \frac{\partial^2 F_{el}^{(3)}(0)}{\partial \epsilon_{13}} \quad (III-81)$$

Assim, usando as definições dos coeficientes A, B, C, D, E, P e Q das eqs(III-67)-(III-73), obtemos:

$$\begin{aligned}\Delta C_{1313} = & (-B^{\epsilon,2} + \sqrt{3/2}P_2^0)^2 (\partial^2 F / \partial D^2) \\ & + (2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial A) \\ & + (2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial B) \\ & + C_{115555}e_{11} + C_{114444}e_{22} + C_{334444}e_{33}\end{aligned}\quad (III-82)$$

$$\begin{aligned}\Delta C_{3131} = & (-B^{\epsilon,2} - \sqrt{3/2}P_2^0)^2 (\partial^2 F / \partial D^2) \\ & + (2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} - B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial A) \\ & + (2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} - B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial B) \\ & + C_{115555}e_{11} + C_{114444}e_{22} + C_{334444}e_{33}\end{aligned}\quad (III-83)$$

$$\begin{aligned}\Delta C_{1212} = & (B^{\gamma,2})^2 (\partial^2 F / \partial C^2) + (2B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\alpha,2}^{\omega,\omega} / 2) (\partial F / \partial A) \\ & + (2B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} - B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}) (\partial F / \partial B) \\ & + [(3/4)C_{222222} - (1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122}]e_{11} \\ & + [(1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122} - (1/4)C_{222222}]e_{22} \\ & + (1/2)(C_{111133} - C_{112233})e_{33}\end{aligned}\quad (III-84)$$

$$\begin{aligned}\Delta C_{2121} = & (B^{\gamma,2})^2 (\partial^2 F / \partial C^2) + (2B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\alpha,2}^{\omega,\omega} / 2) (\partial F / \partial A) \\ & + (2B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}) (\partial F / \partial B) \\ & + [(3/4)C_{222222} - (1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122}]e_{11} \\ & + [(1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122} - (1/4)C_{222222}]e_{22} \\ & + (1/2)(C_{111133} - C_{112233})e_{33}\end{aligned}\quad (III-85)$$

Observamos que neste caso, $C_{1313}(\vec{\sigma}) \neq C_{3131}(\vec{\sigma})$ e $C_{2121}(\vec{\sigma}) \neq C_{1212}(\vec{\sigma})$. As diferenças são devidas tanto aos termos rotacionais como as interações magnetoelásticas, de 1ª e 2ª ordem. O cristal estudado tinha faces planas ortogonais aos eixos a e c, e permitiu observar, como veremos posteriormente, que $C_{1313}(\vec{\sigma}) \neq C_{3131}(\vec{\sigma})$.

Caso 2: $\vec{H} //$ eixo b - $\sigma_x \neq 0$; $\sigma_z = 0$

Neste caso, desprezando a anisotropia do plano basal, que é pequena na região paramagnética, e_1^Y muda de sinal relativamente ao caso 1 ($\vec{H} // \vec{a}$), pois $e_{11}(\vec{H} // \vec{a}) = e_{22}(\vec{H} // \vec{b})$ e $e_{11}(\vec{H} // \vec{b}) = e_{22}(\vec{H} // \vec{a})$. Dos coeficientes da eq.(III-66), definidos nas eqs.(III-67) - (III-73), B, C, D, E e P dependem do sinal de e_1^Y . A maior contribuição para o coeficiente B vem do termo linear $-B^Y, 2 e_1^Y$, e a principal consequência da troca de direção de aplicação do campo é a mudança no sinal de $\partial F / \partial B$. Os termos rotacionais lineares que aparecem nos coeficientes C, D e E não se alteram com a troca da direção de aplicação do campo no plano basal, o que não acontece com alguns termos de 2ª ordem, tanto rotacionais como simétricos ou mistos. As derivadas de F relativas a estes coeficientes (C, D e E) dependem muito pouco da direção do campo. Mas a mudança no sinal de $\partial F / \partial B$ e na energia elástica de 3ª ordem, com a troca da direção de aplicação do campo no plano basal, são responsáveis por efeitos como $C_{2121}(\vec{\sigma} // \vec{a}) \neq C_{2121}(\vec{\sigma} // \vec{b})$ e $C_{3131}(\vec{\sigma} // \vec{a}) \neq C_{3131}(\vec{\sigma} // \vec{b})$, observados neste trabalho. Também as derivadas parciais de F relativas ao coeficiente P da eq.(III-72) devem depender da direção do campo, no plano basal, porque $P = P(e_{11}, e_{22})$. No entanto, é difícil determinar quantitativamente esta dependência, pois a interação magnetoelástica de 1 íon foi suficiente para explicar o comportamento da magnetoestrição no Tb²⁵, de modo que não há na literatura estimativa sobre o valor de $G^Y, 2$. Porém a pequena diferença observada nos comportamentos de $C_{3333}(\vec{\sigma} // \vec{a})$ e $C_{3333}(\vec{\sigma} // \vec{b})$ só pode ser atribuída a este fator.

As expressões para ΔC_{1111} , ΔC_{3333} , ΔC_{1313} , ΔC_{3131} , ΔC_{1212} e ΔC_{2121} são as mesmas encontradas no caso 1.

Caso 3: $\vec{H} //$ eixo c - $\vec{\sigma}_x = 0$; $\vec{\sigma}_z \neq 0$

Neste caso, $e_1^Y = 0$ e $\partial F / \partial B$ é muito pequeno e pode ser desprezado. Assim, obtemos:

$$\begin{aligned} \Delta C_{1111} = & (B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2})^2 (\partial^2 F / \partial A^2) \\ & + [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})]^2 (\partial^2 F / \partial Q^2) \\ & + 2(B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})] (\partial^2 F / \partial A \partial Q) \\ & + 2(B_{\alpha,2}^{\alpha_1, \alpha_1} - B_{\alpha,2}^{\alpha_1, \alpha_2} + B_{\alpha,2}^{\alpha_2, \alpha_2} + B_{\alpha,2}^{Y,Y}) (\partial F / \partial A) \\ & + C_{111111} e_{11} + C_{111111} e_{22} + C_{111133} e_{33} \end{aligned} \quad (\text{III-86})$$

$$\begin{aligned} \Delta C_{3333} = & (B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2})^2 (\partial^2 F / \partial A^2) \\ & + [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})]^2 (\partial^2 F / \partial Q^2) \\ & - 2(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})] (\partial^2 F / \partial A \partial Q) \\ & + (2B_{\alpha,2}^{\alpha_1, \alpha_1} + 4B_{\alpha,2}^{\alpha_1, \alpha_2} + 8B_{\alpha,2}^{\alpha_2, \alpha_2}) (\partial F / \partial A) \\ & + C_{113333} (e_{11} + e_{22}) + C_{333333} e_{33} \end{aligned} \quad (\text{III-87})$$

$$\begin{aligned} \Delta C_{1313} = & (-B^{\epsilon,2} + \sqrt{3/2} P_2^0)^2 (\partial^2 F / \partial D^2) \\ & + (2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_1} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2, \epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial A) \\ & + C_{115555} e_{11} + C_{114444} e_{22} + C_{334444} e_{33} \end{aligned} \quad (\text{III-88})$$

$$\begin{aligned} \Delta C_{3131} = & (-B^{\epsilon,2} - \sqrt{3/2} P_2^0)^2 (\partial^2 F / \partial D^2) \\ & + (2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_1} - B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2, \epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial A) \\ & + C_{115555} e_{11} + C_{114444} e_{22} + C_{334444} e_{33} \end{aligned} \quad (\text{III-89})$$

$$\begin{aligned}
\Delta C_{1212} &= \Delta C_{2121} = (B^{\gamma, 2})^2 (\partial^2 F / \partial C^2) \\
&+ (2B_{\alpha, 2}^{\gamma, \gamma} + B_{\alpha, 2}^{\omega, \omega} / 2) (\partial F / \partial A) \\
&+ [(3/4)C_{222222} - (1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122}]e_{11} \\
&+ [(1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122} + (1/4)C_{222222}]e_{22} \\
&+ (1/2)(C_{111133} - C_{112233})e_{33}
\end{aligned} \tag{III-90}$$

Novamente neste caso $C_{1313}(\vec{\sigma}) \neq C_{3131}(\vec{\sigma})$. Entretanto, como $e_1^{\gamma} = 0$ e $\partial F / \partial B$ é desprezível, $C_{1212}(\vec{\sigma}) = C_{2121}(\vec{\sigma})$.

Vemos agora que as constantes elásticas de 2ª ordem dependem de um número muito grande de constantes magnetoelásticas de 1ª e 2ª ordem, além de constantes elásticas de 3ª ordem. Elas também dependem do comportamento das derivadas da energia livre relativas aos coeficientes A, ..., Q. Mesmo que fossem conhecidas as constantes elásticas de 3ª ordem e as deformações magnetoestrictivas estáticas em função do campo magnético, e que também as derivadas da energia livre constituíssem um conjunto de funções ortogonais da magnetização, seria bastante difícil determinar todas as constantes de acoplamento magnetoelástico que aparecem nas expressões das constantes elásticas. Na verdade, considerando as várias aproximações necessárias para uma computação numérica da energia livre, não devemos considerar qualquer concordância quantitativa entre o modelo teórico e a experiência como significativa. No capítulo V nós mostramos alguns resultados numéricos obtidos com este modelo, mas antes disso, vamos considerar alguns aspectos qualitativos dos resultados aqui obtidos, de significado físico real e independente das limitações da análise numérica do modelo.

Vamos primeiro considerar a contribuição magnetoelástica

para as constantes elásticas advinda dos termos que envolvem as componentes antissimétricas de $\vec{\epsilon}$. Assim, vamos analisar as diferenças:

$$1- C_{1313} - C_{3131}$$

Para \vec{H}/\vec{a} ou \vec{b} , usando as eqs. (III-82) e (III-83), obtemos:

$$C_{1313} - C_{3131} = -2\sqrt{6}B^{\epsilon,2}P_2^0(\partial^2 F/\partial D^2) + 2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2}(\partial F/\partial A) + 2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2}(\partial F/\partial B) \quad (\text{III-91})$$

Para \vec{H}/\vec{c} , vale a mesma expressão, exceto que aí $(\partial F/\partial B)=0$. Vemos que a eq. (III-91) inclui constantes magnetoelásticas de 1ª e 2ª ordem. $-2\sqrt{6}B^{\epsilon,2}P_2^0(\partial^2 F/\partial D^2)$ é um termo de natureza rotacional que vem dos seguintes termos de $\vec{H}_{me}^{I,1}$ (eq. (III-52)):

$$-B^{\epsilon,2}[e_1^{\epsilon}Q_{21}^-(\vec{J}) + e_2^{\epsilon}Q_{21}^+(\vec{J})]$$

e

$$\sqrt{6}P_2^0[\omega_1^{\epsilon}Q_{21}^-(\vec{J}) + \omega_2^{\epsilon}Q_{21}^+(\vec{J})]$$

As constantes magnetoelásticas de 2ª ordem vem dos seguintes termos de $\vec{H}_{me}^{I,2}$ (eq. (III-67)):

$$B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2}(e_1^{\epsilon}\omega_1^{\epsilon} + e_2^{\epsilon}\omega_2^{\epsilon})Q_2^0(\vec{J})$$

e

$$B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2}(e_1^{\epsilon}\omega_1^{\epsilon} - e_2^{\epsilon}\omega_2^{\epsilon})Q_{22}^+(\vec{J})$$

Considerando que a parte da energia interna do sistema magnetoelástico (U) dependente das deformações dinâmicas vale

$$U = \langle m | H_{me}^{rf} | m \rangle = \langle H_{me}^{rf} \rangle \quad (\text{III-92})$$

e usando as definições de H_{me}^{rf} da eq. (III-66), temos:

$$(\partial U/\partial A) = (\partial F/\partial A) = \langle Q_2^0(\vec{J}) \rangle \quad (\text{III-93})$$

e

$$(\partial U/\partial B) = (\partial F/\partial B) = \langle Q_{22}^+(\vec{J}) \rangle \quad (\text{III-94})$$

As médias $\langle Q_2^0(\vec{J}) \rangle$ e $\langle Q_{22}^+(\vec{J}) \rangle$ variam aproximadamente com σ^2 na região paramagnética¹⁸, e o mesmo ocorre com $\partial F/\partial A$ e $\partial F/\partial B$. Uma vez que o comportamento das derivadas segundas de F não é muito distinto deste, em geral fica difícil determinar quais das constantes, de 1ª ou 2ª ordem, são mais importantes.

2- $C_{1212} - C_{2121}$

Neste caso, a diferença para \vec{H}/\vec{C} é nula e para \vec{H}/\vec{a} ou \vec{b} , ela pode ser obtida das eqs. (III-84) e (III-85) como:

$$C_{1212} - C_{2121} = -2B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}(\partial F/\partial B) \quad (\text{III-95})$$

A única diferença entre C_{1212} e C_{2121} vem de um acoplamento de 2ª ordem (eq. (III-57)) da forma

$$B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega} e_{20}^{\gamma} Q_{22}^+(\vec{J})$$

o que tornaria fácil a determinação de $B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}$. Entretanto, devemos lembrar que limitamos a hamiltoniana anteriormente a termos de ordem $\ell > 2$ nos operadores de momento angular. Com isso, negligenciamos um termo de 1ª ordem nas deformações que também pode contribuir para esta diferença. Na eq. (III-52) este termo tem a forma:

$$-6P_{60}^6 e_{60}^{\gamma} Q_{66}^-(\vec{J})$$

Uma vez que $\langle Q_{22}^+(\vec{J}) \rangle \propto \sigma^2$ e $\langle Q_{66}^-(\vec{J}) \rangle \propto \sigma^6$, na região paramagnética, é possível determinar a importância relativa destes dois termos, pela análise da diferença experimental observada. Isto não foi feito neste trabalho porque o cristal estudado não permitia a medição de C_{1212} .

Vamos agora considerar a variação das constantes elásticas C_{1111} , C_{3333} , C_{2121} e C_{3131} - as medições experimentalmente - quando a direção de aplicação do campo magnético muda de \vec{a} para \vec{b} . Usando as eqs. (III-79)-(III-85), temos:

$$\begin{aligned}
 C_{1111}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - C_{1111}(\vec{\sigma} // \vec{b}) = & \\
 & -2B^{\gamma,2}(B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) \left[\frac{\partial^2 F}{\partial A \partial B}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - \frac{\partial^2 F}{\partial A \partial B}(\vec{\sigma} // \vec{b}) \right] \\
 & -2B^{\gamma,2} [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^{\gamma,2}] \left[\frac{\partial^2 F}{\partial B \partial P}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - \frac{\partial^2 F}{\partial B \partial P}(\vec{\sigma} // \vec{b}) \right] \\
 & + 2(B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1} - B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2}) \left[\frac{\partial F}{\partial B}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - \frac{\partial F}{\partial B}(\vec{\sigma} // \vec{b}) \right] \\
 & + C_{111111} [e_{11}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - e_{11}(\vec{\sigma} // \vec{b})] \\
 & + C_{111122} [e_{22}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - e_{22}(\vec{\sigma} // \vec{b})] \quad \quad \quad (III-96)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_{3333}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - C_{3333}(\vec{\sigma} // \vec{b}) = & \\
 & [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})]^2 \left[\frac{\partial^2 F}{\partial P^2}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - \frac{\partial^2 F}{\partial P^2}(\vec{\sigma} // \vec{b}) \right] \quad (III-97)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_{2121}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - C_{2121}(\vec{\sigma} // \vec{b}) = & \\
 & (2B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} - B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}) \left[\frac{\partial F}{\partial B}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - \frac{F}{B}(\vec{\sigma} // \vec{b}) \right] \\
 & + [(3/4)C_{222222} - (1/4)C_{111111} - (1/2)C_{111122}] [e_{11}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - e_{11}(\vec{\sigma} // \vec{b})] \\
 & + [(1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122} - (1/4)C_{222222}] [e_{22}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - e_{22}(\vec{\sigma} // \vec{b})] \\
 & \quad \quad \quad (III-98)
 \end{aligned}$$

$$C_{3131}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - C_{3131}(\vec{\sigma} // \vec{b}) =$$

$$(2B_{Y,2}^{\epsilon_1, \epsilon_1} - B_{Y,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} + B_{Y,2}^{\epsilon_2, \epsilon_2} / 2) \left[\frac{\partial F}{\partial B}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - \frac{\partial F}{\partial B}(\vec{\sigma} // \vec{b}) \right]$$

$$+ C_{115555} [e_{11}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - e_{11}(\vec{\sigma} // \vec{b})] + C_{114444} [e_{22}(\vec{\sigma} // \vec{a}) - e_{22}(\vec{\sigma} // \vec{b})]$$

(III-99)

que mostra uma dependência tanto nas constantes magnetoelásticas de 1ª e 2ª ordem, como nas constantes elásticas de 3ª ordem.

Nos dois casos de constantes elásticas transversais, as diferenças vem dos termos com constantes magnetoelásticas de 2ª ordem e com constantes elásticas de 3ª ordem. Na verdade, é a observação experimental de que estas diferenças existem que motiva a inclusão da interação magnetoelástica de 2ª ordem e a energia elástica de 3ª ordem no modelo.

É importante ainda mencionar a influência do método de medida nos fenômenos que queremos explicar. Nós queremos comparar os resultados teóricos desta seção com as constantes elásticas medidas experimentalmente, com técnicas de ultrassom.

As medidas da velocidade do som foram medidas pelo retardo entre ecos de pulsos com frequências de 10 a 20 MHz, o que corresponde a comprimentos de onda (λ) de cerca de 0,3 mm. Usualmente, constantes elásticas medidas desta forma são adiabáticas, porque devido a grande velocidade de propagação do som, praticamente não há fluxo de energia no cristal. Entretanto, nas terras raras, os tempos de relaxação spin-rede e spin-spin são muito pequenos⁶³ (da ordem ou ainda menores do que 10^{-10} s), menores portanto que o tempo característico entre as compressões e expansões da rede ($\sim 10^{-8}$ s). Isto permite um fluxo de energia que equaliza a temperatura do cristal, e as constantes elásticas medidas por ultrassom

são isotérmicas.

A interação de troca depende fortemente da distância entre os íons e embora as medidas de constantes elásticas sejam tomadas a campo magnético constante, a magnetização local é função das deformações dinâmicas impostas no cristal.

Assim, as derivadas segundas de F relativas as funções das deformações, pelas quais queremos caracterizar o comportamento das constantes elásticas como função da magnetização, devem ser calculadas a temperatura e campo magnético constante.

CAPÍTULO IV

RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Neste capítulo nós apresentamos os resultados experimentais obtidos sobre o comportamento das constantes elásticas do Tb com a magnetização, e os comparamos qualitativamente com os resultados do modelo teórico. Nós também mostramos os comportamentos observados da magnetização e da atenuação de ultrasom, como função do campo magnético.

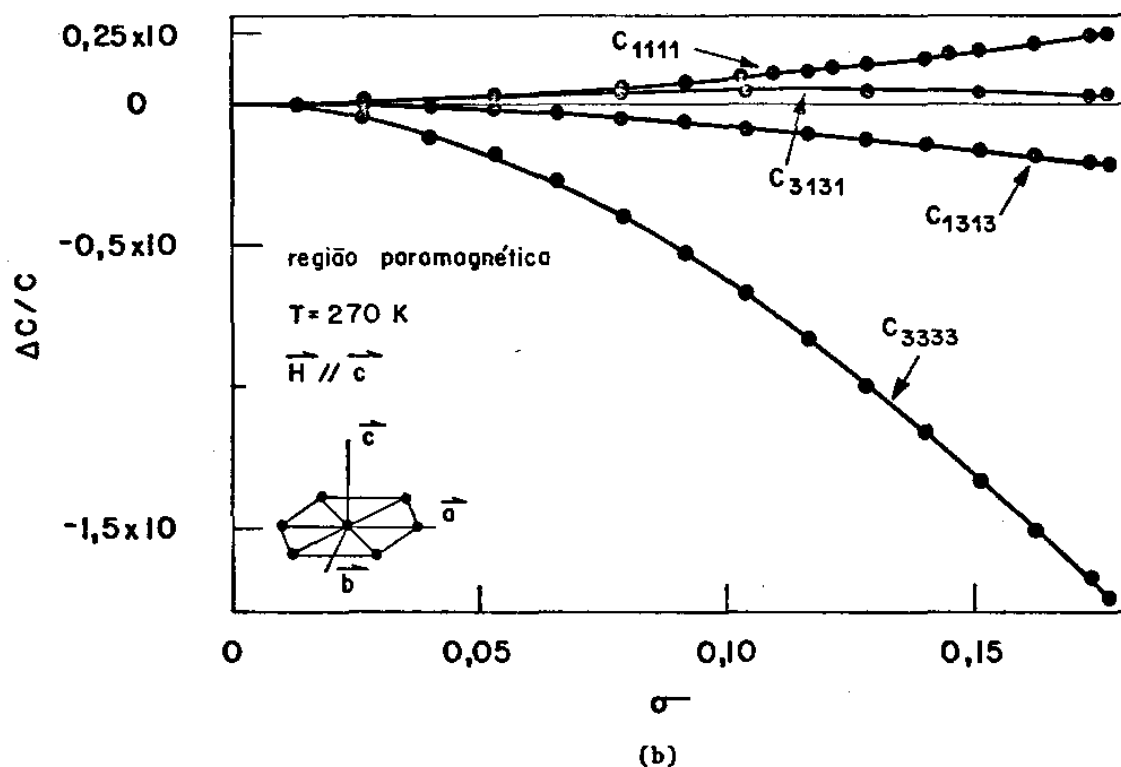
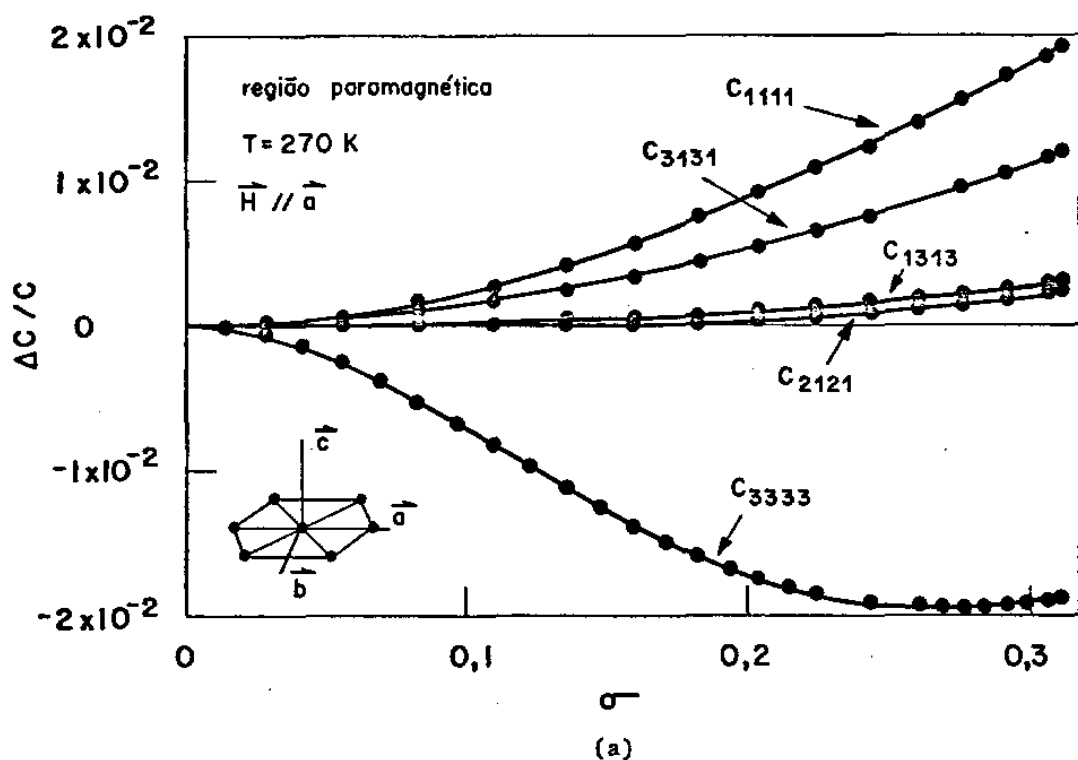
IV.1 - Comportamento das Constantes Elásticas com Magnetização -

Foram as seguintes as constantes elásticas medidas com as respectivas direções de aplicação de campo magnético:

Constante	$\vec{H} //$	Valor a $\vec{H} = 0$
Elástica	aos eixos	[300 K, $\times 10^{11}$ dyn/cm ²] ³¹
C_{1111} (C_{11})	$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$	6,788
C_{3333} (C_{33})	$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$	7,225
C_{3131} (C_{55})	$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$	2,140
C_{1313} (C_{55})	\vec{a}, \vec{c}	2,140
C_{2121} (C_{66})	\vec{a}, \vec{b}	1,878

As tabelas com estes resultados estão no apêndice C. Os dados foram tomados em várias temperaturas do intervalo 4,2-300 K, em campos magnéticos de até 73 kOe. A aplicação de campo na direção \vec{c} , em temperaturas menores do que T_N (229 K) aumenta muito a atenuação, o que impediu que fossem feitas medidas de velocidade do som nesta região. O comportamento típico das constantes elásticas medidas, com magnetização, nas regiões para e ferromagnéticas, é mostrado na fig.(IV-1). Por $\Delta C/C$ nós entendemos a variação relativa das constantes elásticas:

$$\frac{\Delta C}{C} = \frac{C(\vec{\sigma}) - C(\vec{\sigma}_0)}{C(\vec{\sigma}_0)} \quad (IV-1)$$



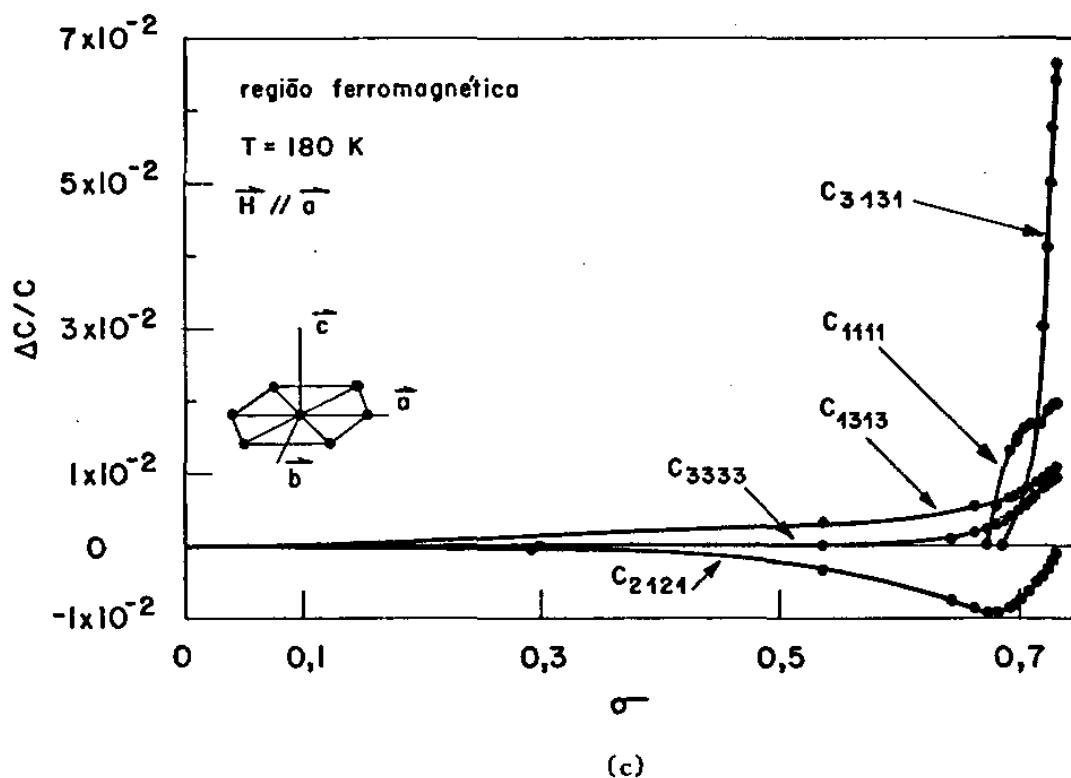


Fig.(IV-1) - Comportamento Típico das Constantes Elásticas do Têrbio com a Magnetização. (a) região paramagnética ($T=270 \text{ K}$) com campo magnético aplicado no plano basal; (b) região paramagnética ($T=270 \text{ K}$) com campo magnético na direção c; (c) região ferromagnética ($T=180 \text{ K}$) com campo magnético no plana basal.

Em geral, $\vec{\sigma}_0$ foi tomado como 0, isto é:

$$\vec{\sigma}_0 = \vec{\sigma}(\vec{H}=0) = 0 \quad (\text{IV-2})$$

Na região ferromagnética, embora haja magnetização espontânea, a magnetização total a campo zero é nula, devido a presença de domínios, e os $\Delta C/C$ são referidos ao valor da constante elástica a campo zero. Nos casos em que ocorre forte atenuação a campo zero, e esta atenuação diminui com a aplicação de campo no plano basal (C_{1111} e C_{3131} na região ferromagnética - fig.(IV-1c)), $C(\vec{\sigma}_0)$ é a constante elástica medida com o menor campo suficiente para permitir a observação de ecos.

Em geral, o comportamento das constantes elásticas longitudinais não depende muito da direção de aplicação do campo no plano basal e como será visto, esta dependência é bem acentuada nas constantes elásticas transversais.

No que segue, nós mostramos os detalhes do comportamento das constantes elásticas estudadas. As curvas $\Delta C(\vec{\sigma})/C$, na região paramagnética, foram ajustadas com a função

$$(\Delta C/C) = A\sigma^2 + B\sigma^4 + C\sigma^6 \quad (\text{IV-3})$$

pelo método de mínimos quadrados. Seguindo o cálculo de Callen e Callen¹⁶, com a aproximação $J=\infty$, a média termodinâmica dos esféricos harmônicos pode ser escrita como

$$\langle Y_{\ell}^0(\theta, \phi) \rangle = \hat{I}_{\ell+1/2} [L^{-1}(\sigma)] = \frac{I_{\ell+1/2} [L^{-1}(\sigma)]}{I_{1/2} [L^{-1}(\sigma)]} \quad (\text{IV-4})$$

onde I é a função de Bessel hiperbólica e L^{-1} a função de Langevin inversa. Para $\sigma \ll 1$, ou equivalentemente, na região paramagnética sem campo muito elevado, temos²²:

$$\langle Q_{\ell}^m(J) \rangle \propto \langle Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \rangle \propto \sigma^{\ell} \quad (\text{IV-5})$$

Assim, o ajuste das curvas experimentais com a função da eq.(IV-3) tem o sentido de indicar a importância relativa dos termos de ordem $\ell=2, 4$ e 6 nos operadores de momento angular.

Vamos agora verificar o comportamento das várias constantes elásticas como função da magnetização:

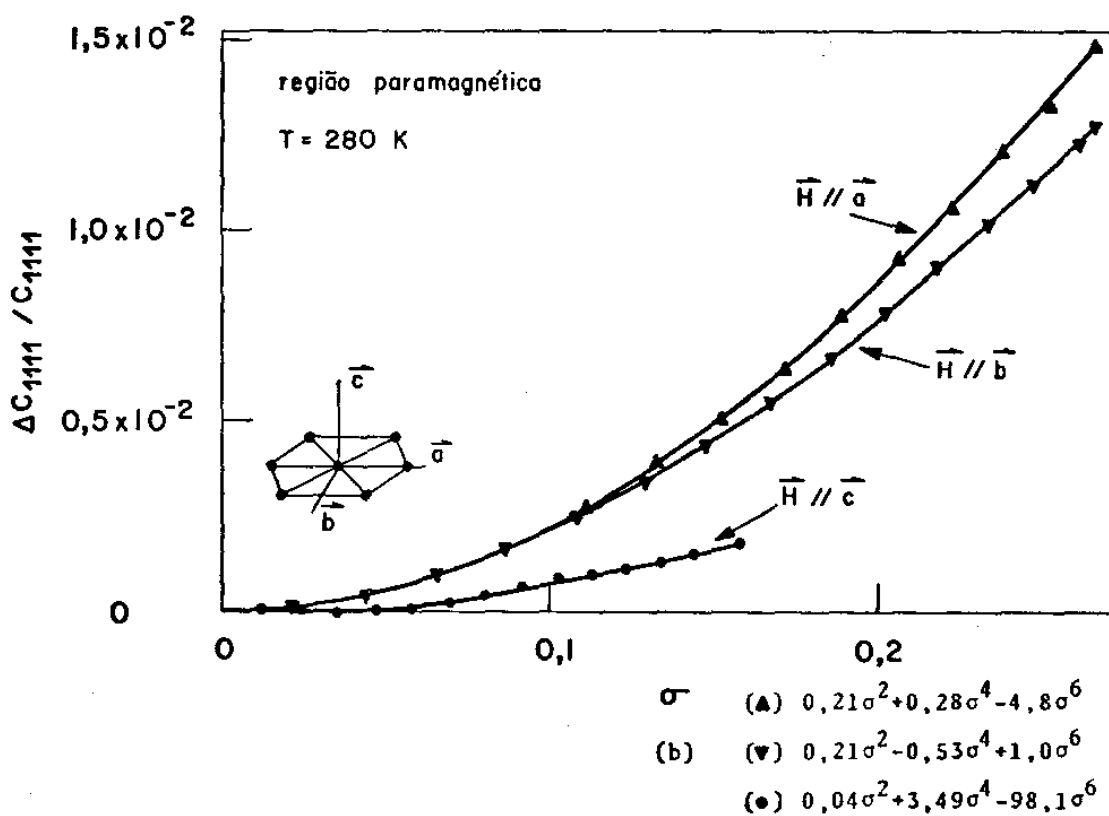
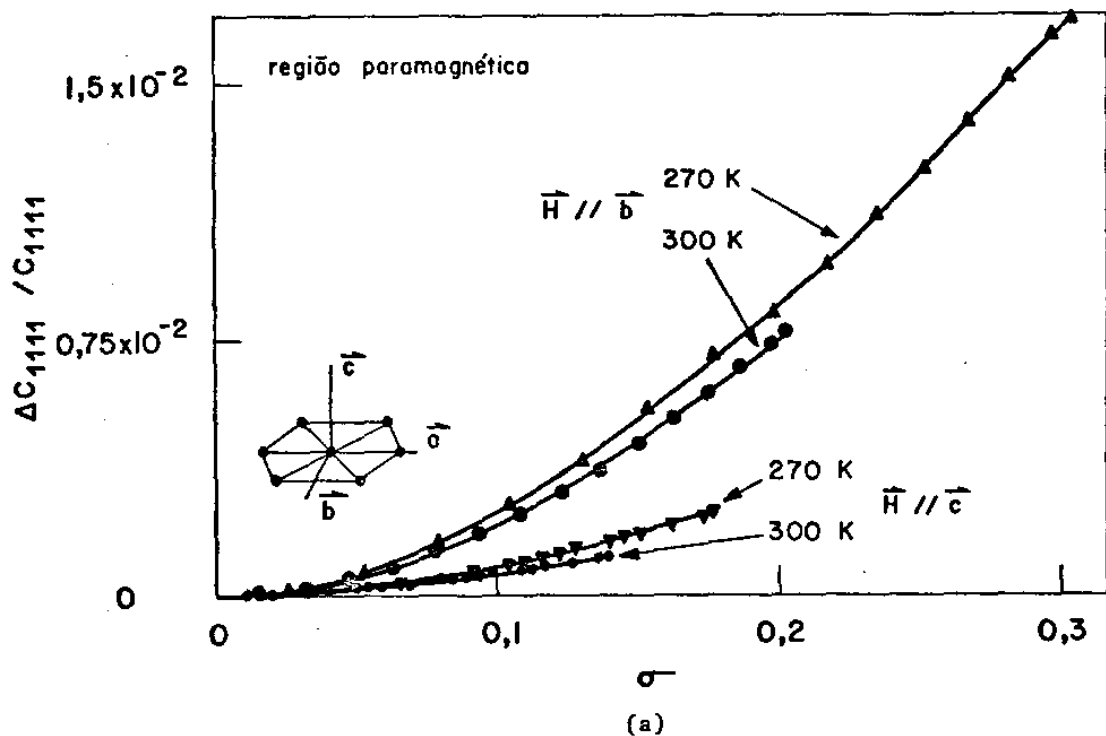
1- C_{1111} - fig.(IV-2)

Na região paramagnética as dependências de $C_{1111}(\vec{\sigma})$ com temperatura (fig.(IV-2a)) e com a direção do campo no plano basal (figs.(IV-2a e 2b)) são pequenas. A dependência térmica é justificada pela dependência de F e suas derivadas e das deformações estáticas, que aparecem nas eq.(III-79) e (III-86). A dependência com a direção do campo magnético no plano basal, quando este está nas direções \vec{a} ou \vec{b} , vem da troca de sinal que e_1^Y sofre entre estas duas direções de campo, e tanto termos de 1ª e 2ª ordem nas deformações como a energia elástica de 3ª ordem (eq.(III-96)) contribuem para o comportamento observado. Os ajustes com a eq.(IV-3) mostram que os termos de 2ª ordem ($\ell=2$) nos operadores de momento angular são os que mais contribuem para o comportamento observado, pois embora $A < B < C$, em geral $A\sigma^2 > B\sigma^4 > C\sigma^6$.

Na região ferromagnética, o comportamento de $C_{1111}(\vec{\sigma})$ só pode ser observado com aplicação de campo no plano basal, em campos maiores do que o mínimo necessário para diminuir a atenuação e permitir a observação de ecos.

2- C_{3333} - fig.(IV-3)

Quando o campo magnético é aplicado no plano basal, C_{3333} é função decrescente da magnetização, até que um certo valor seja



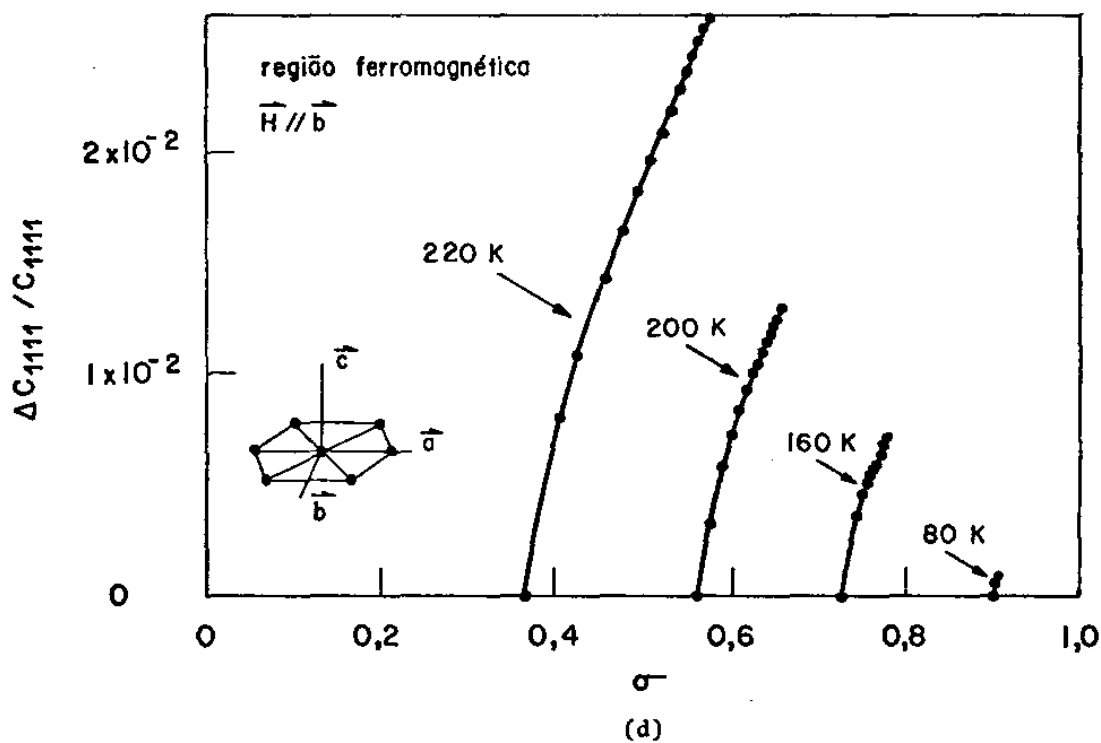
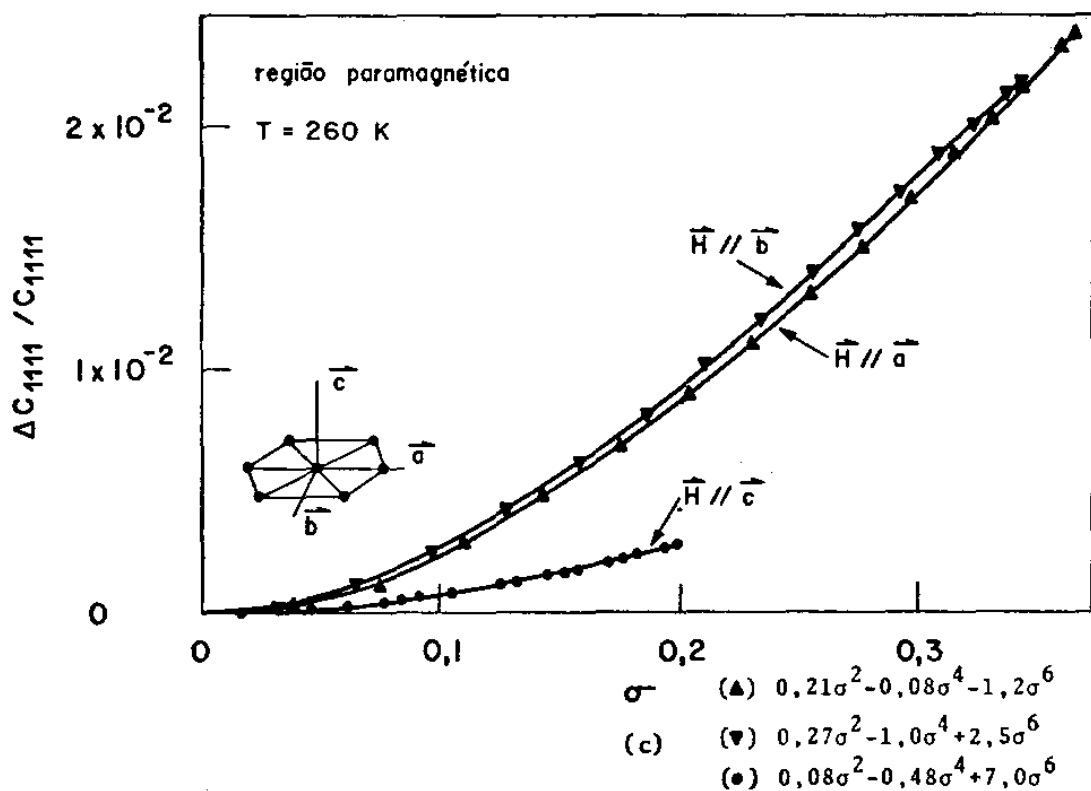
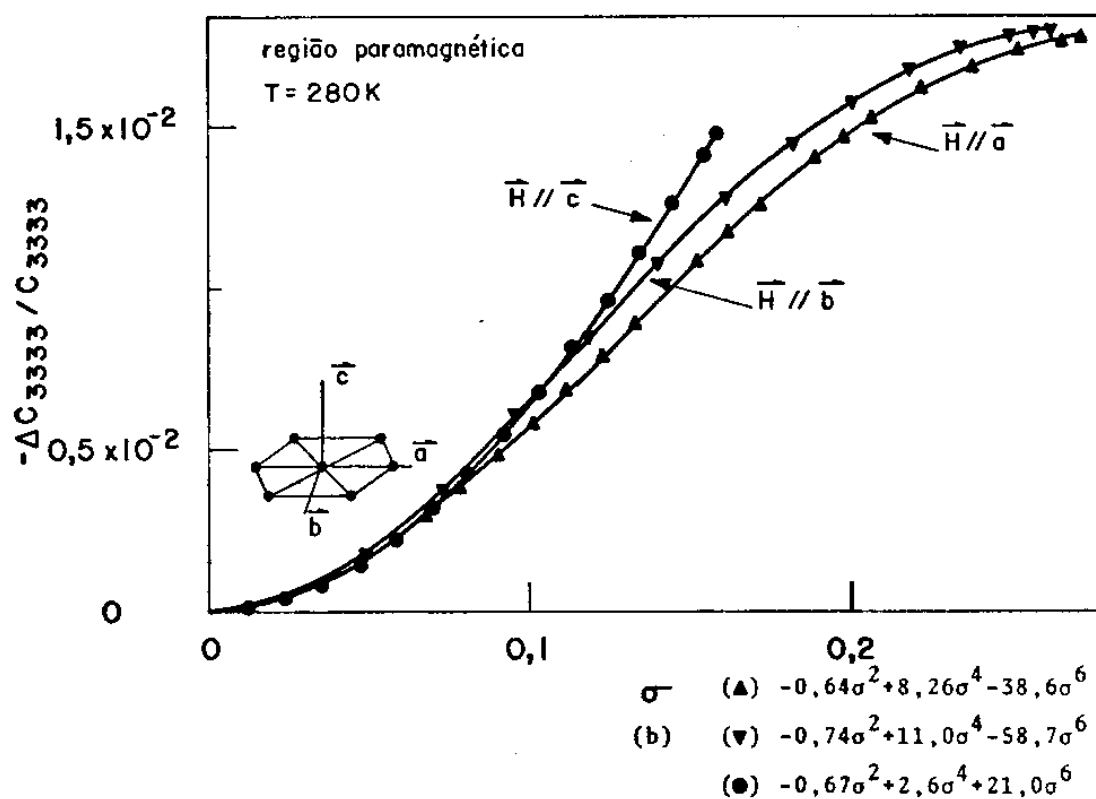
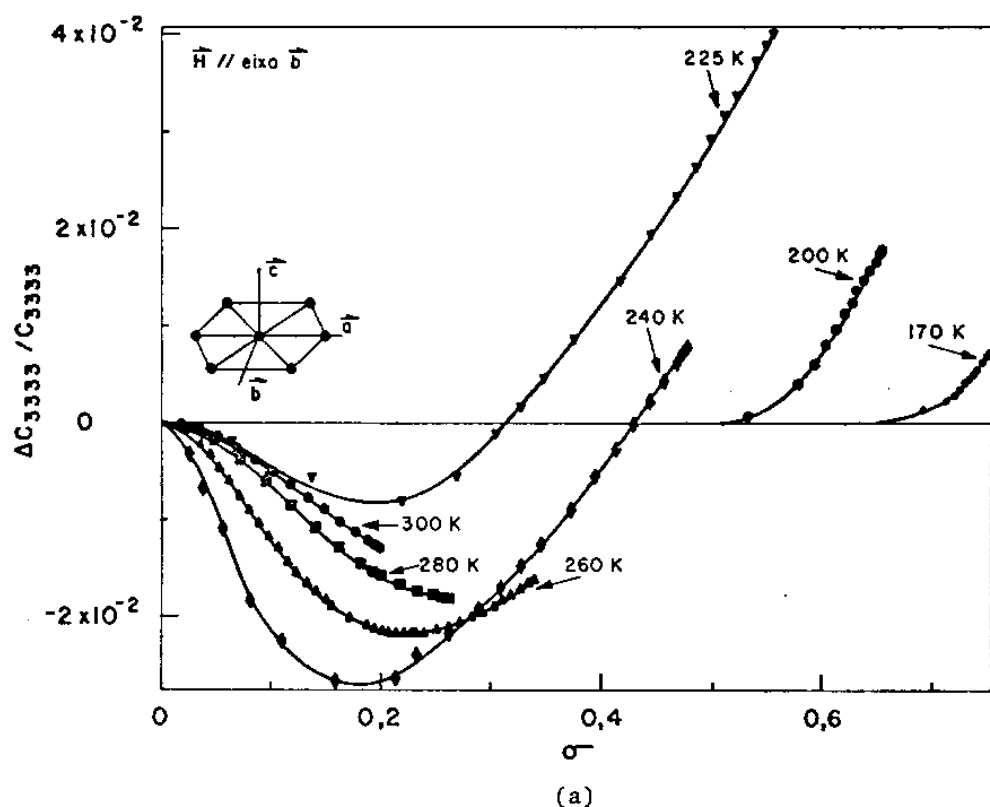


Fig.(IV-2) - Comportamento de C_{1111} com a Magnetização.



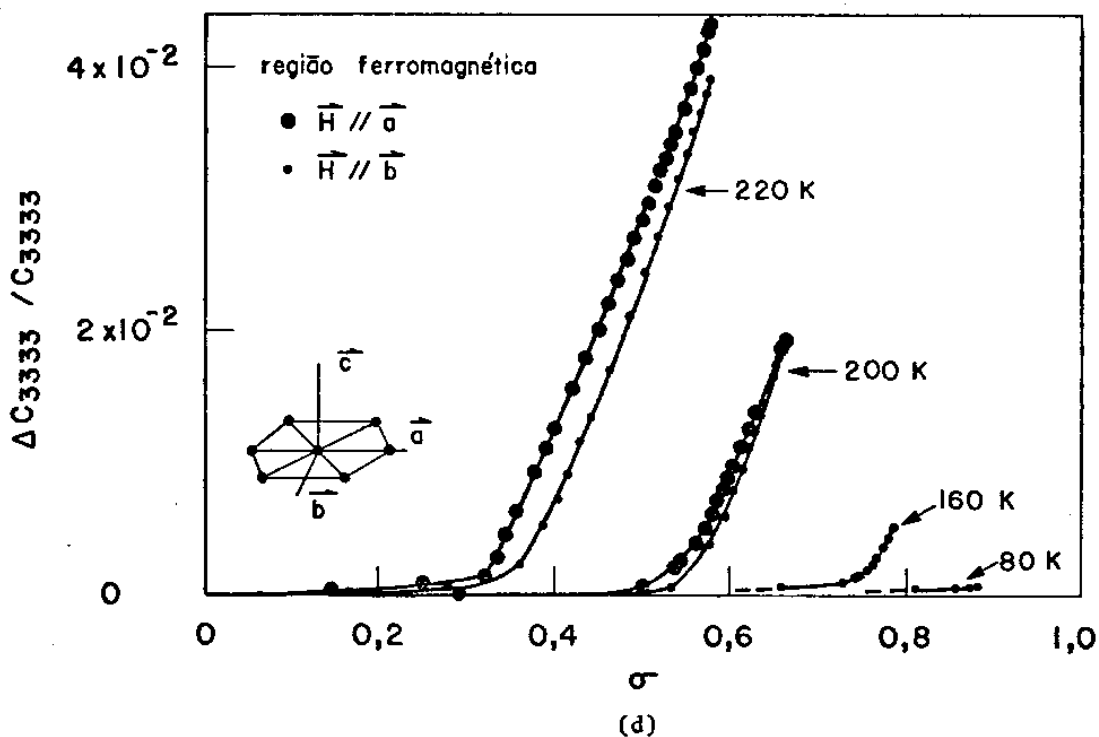
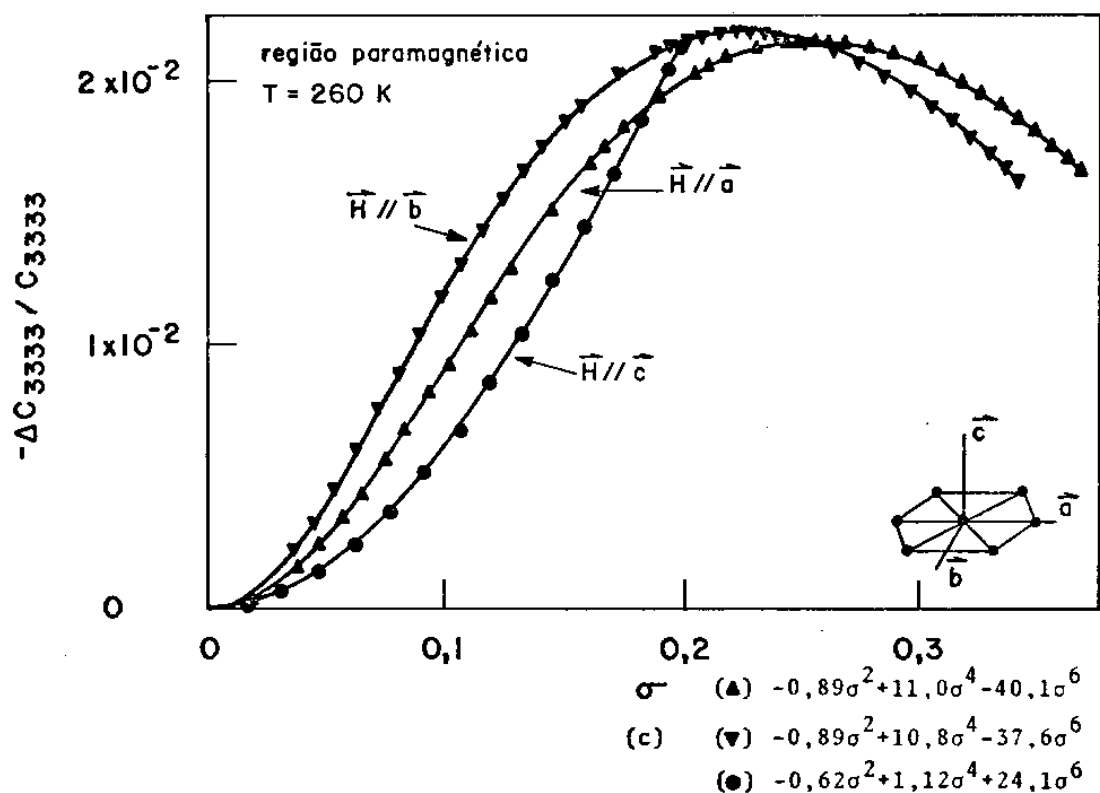


Fig.(IV-3) - Comportamento de C_{3333} com a Magnetização.

atingido. Os valores de C_{3333} e de $\vec{\sigma}$ deste ponto decrescem com a temperatura, e a partir dele $C_{3333}(\vec{\sigma})$ passa a ser uma função crescente. Uma vez que na fase ferromagnética ocorre magnetização espontânea, C_{3333} é a função sempre crescente, embora a dependência com $\vec{\sigma}$ abaixo de 100 K seja muito pequena. O ajuste dos resultados da região paramagnética com as potências de σ indica também que os termos em $\ell=2$ são os mais importantes, embora os de $\ell=4$ e $\ell=6$ sejam muito mais relevantes do que em C_{1111} . A pequena dependência de $C_{3333}(\vec{\sigma})$ com a direção do campo no plano basal é devida apenas a pequena dependência de $\partial^2 F / \partial P^2$ com esta direção.

3- C_{2121} - fig.(IV-4)

O comportamento de $C_{2121}(\vec{\sigma})$ é fortemente dependente da direção de aplicação do campo no plano basal, em todas as fases de ordem magnética. A eq.(III-98) mostra que essa diferença só pode ser atribuída a duas interações de ordem superior: o acoplamento magnetoelástico de 2ª ordem e a energia elástica de 3ª ordem. Na verdade, assim como ocorre com o comportamento de $C_{3131}(\vec{\sigma})$, este tipo de dependência constitui a única evidência da importância destas duas interações de ordem superior nas deformações. O ajuste de $\Delta C_{2121} / C_{2121}$ com a eq.(IV-3) mostra que também aqui os termos com $\ell=2$ são os mais importantes.

4- C_{3131} - fig.(IV-5)

A dependência de $C_{3131}(\vec{\sigma})$ com a temperatura é geralmente grande quando o campo é aplicado no plano basal e pequena quando na direção \vec{c} . Como as outras constantes elásticas, C_{3131} não pode ser medida na região ferromagnética com campo aplicado no eixo \vec{c} . Como C_{1111} , C_{3131} pode ser medida nesta região após a aplicação de um campo magnético suficiente, no plano basal, para diminuir a atenuação. Como em C_{2121} , ocorre uma dependência de $C_{3131}(\vec{\sigma})$ com a direção de aplicação do campo no plano basal e esta dependência pode ser atribuída apenas as contribuições de ordem superior nas de-

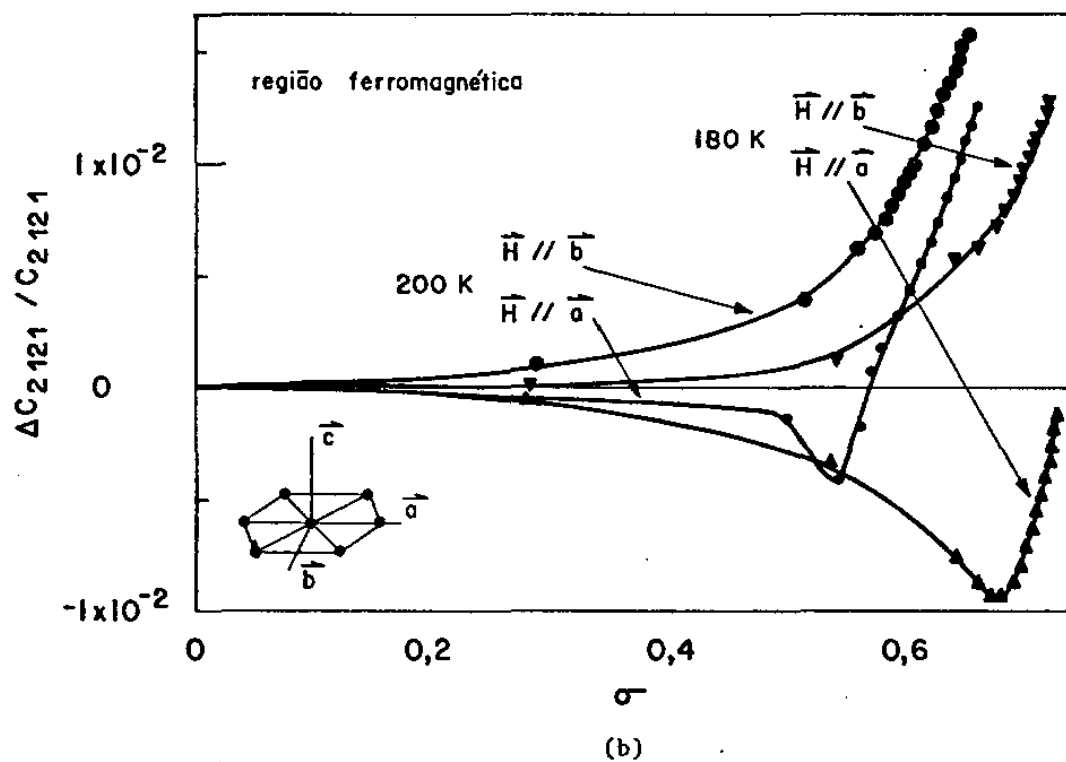
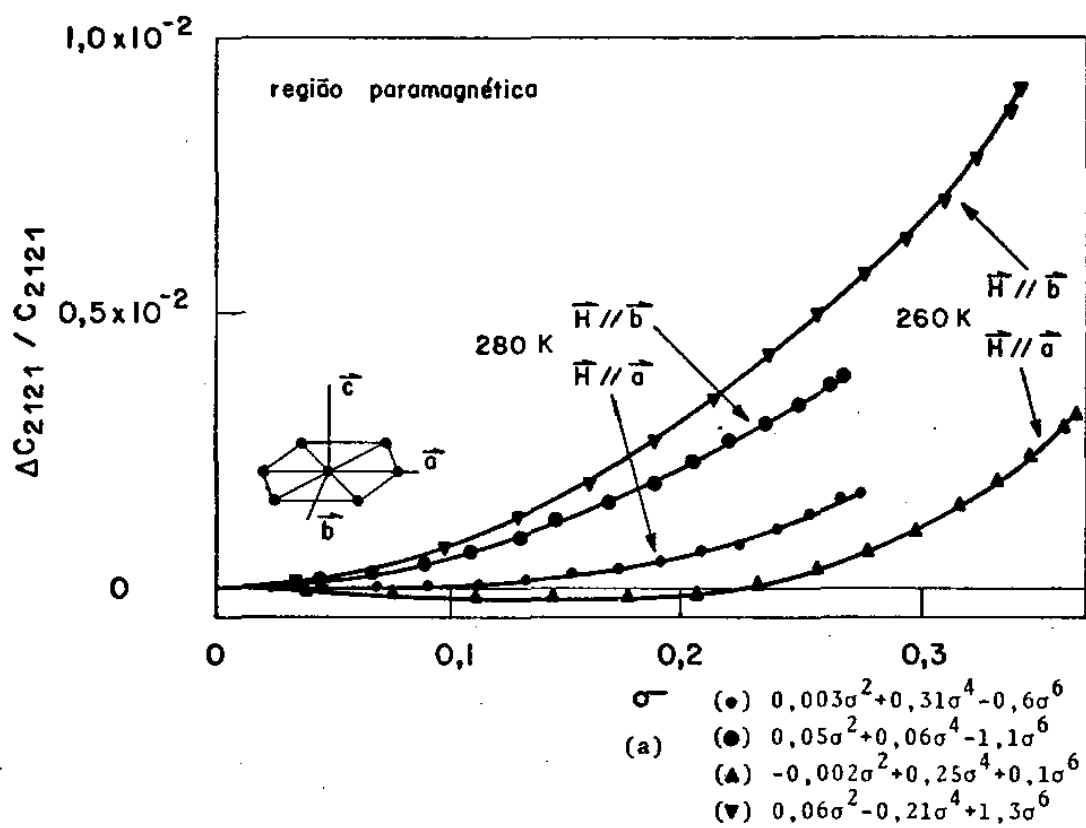
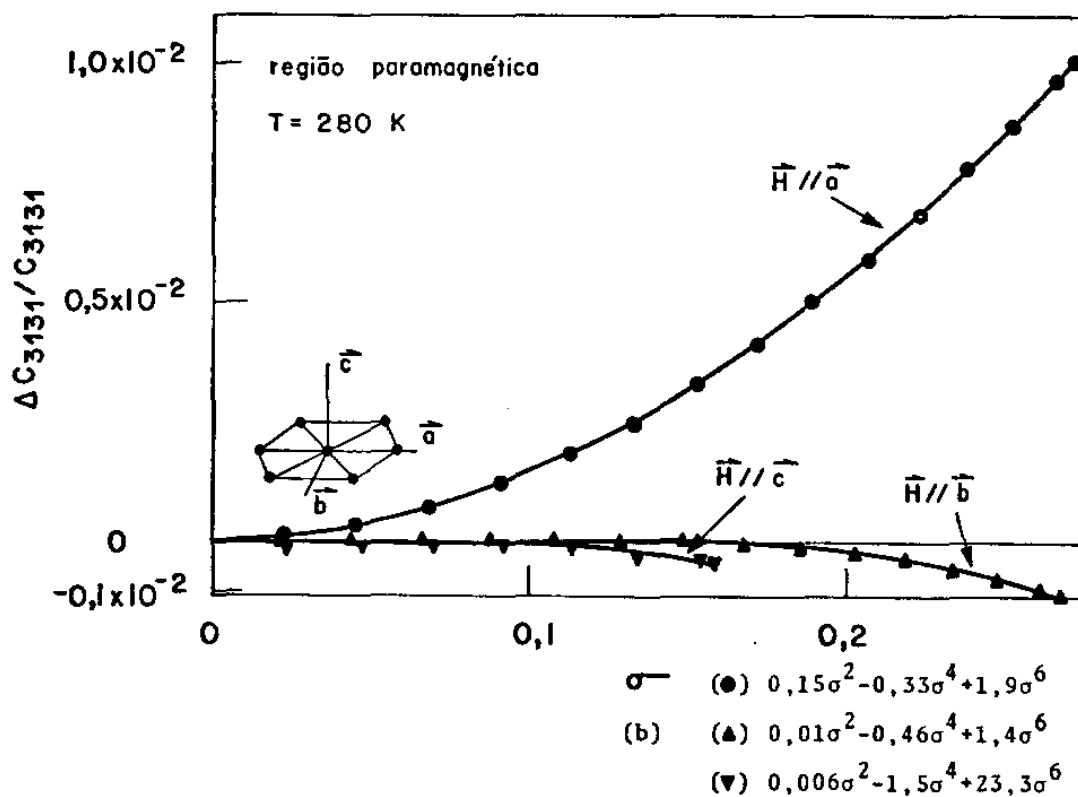
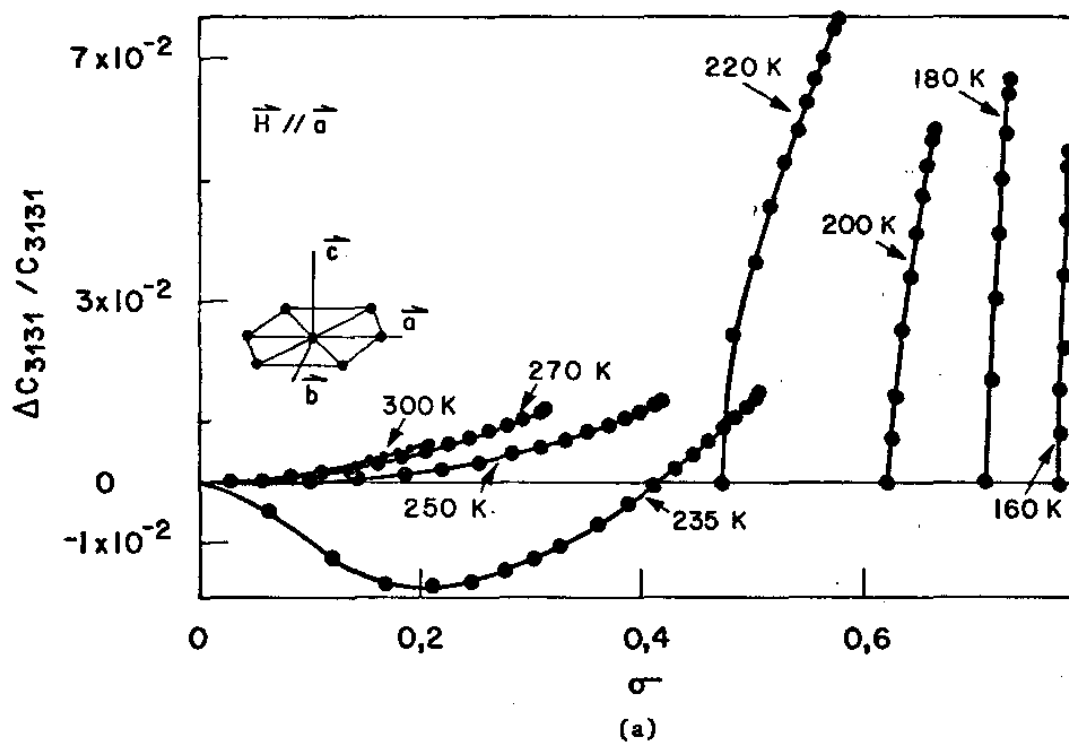


Fig.(IV-4) - Comportamento de C_{2121} com a Magnetização.



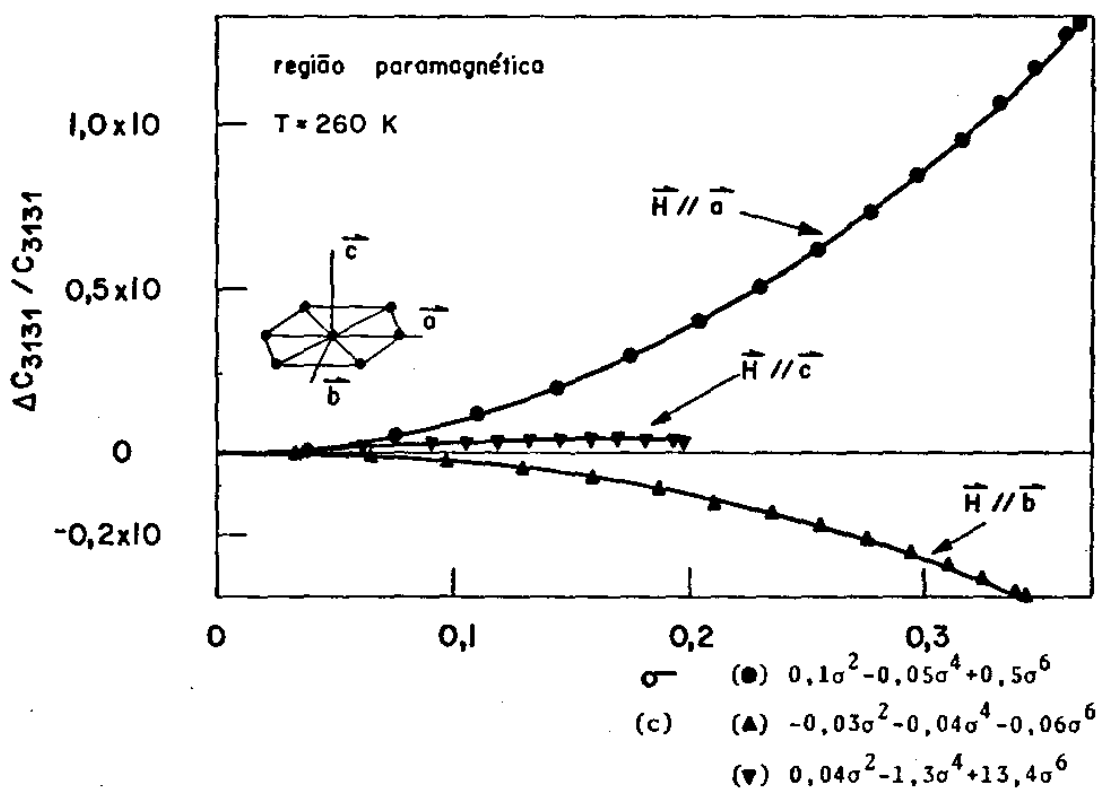


Fig.(IV-5) - Comportamento de C_{3131} com a Magnetização.

formações (eq.(III-99)).

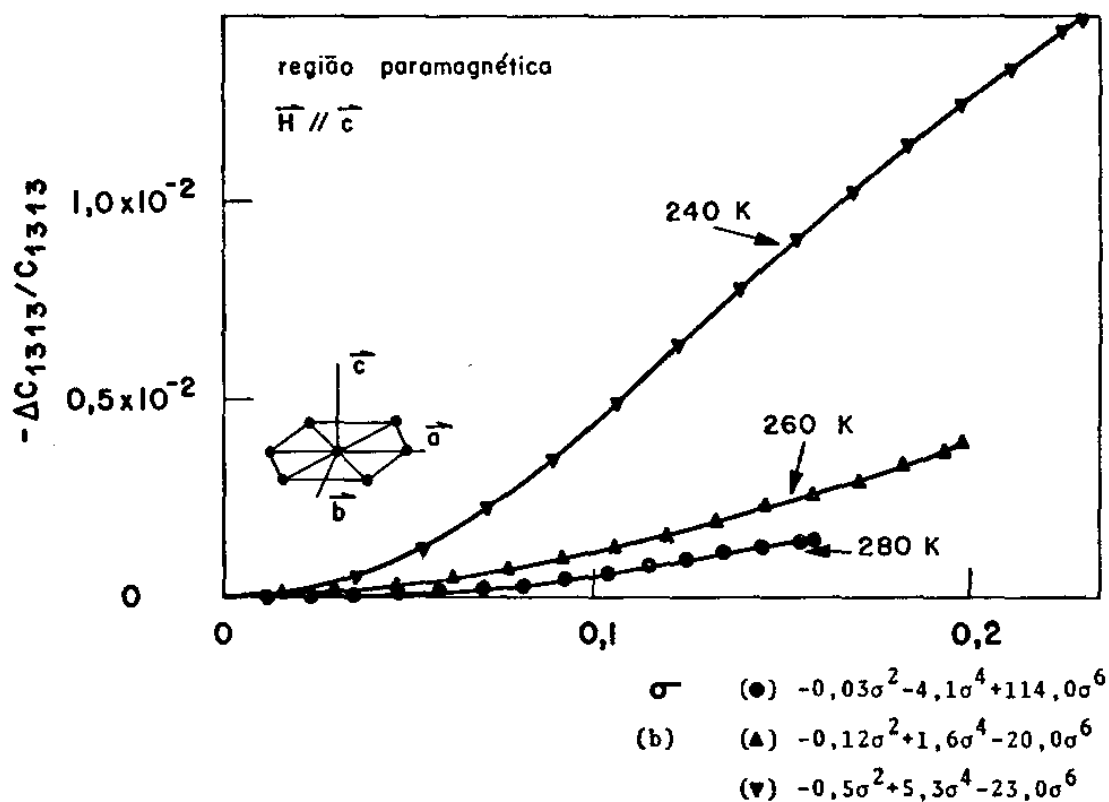
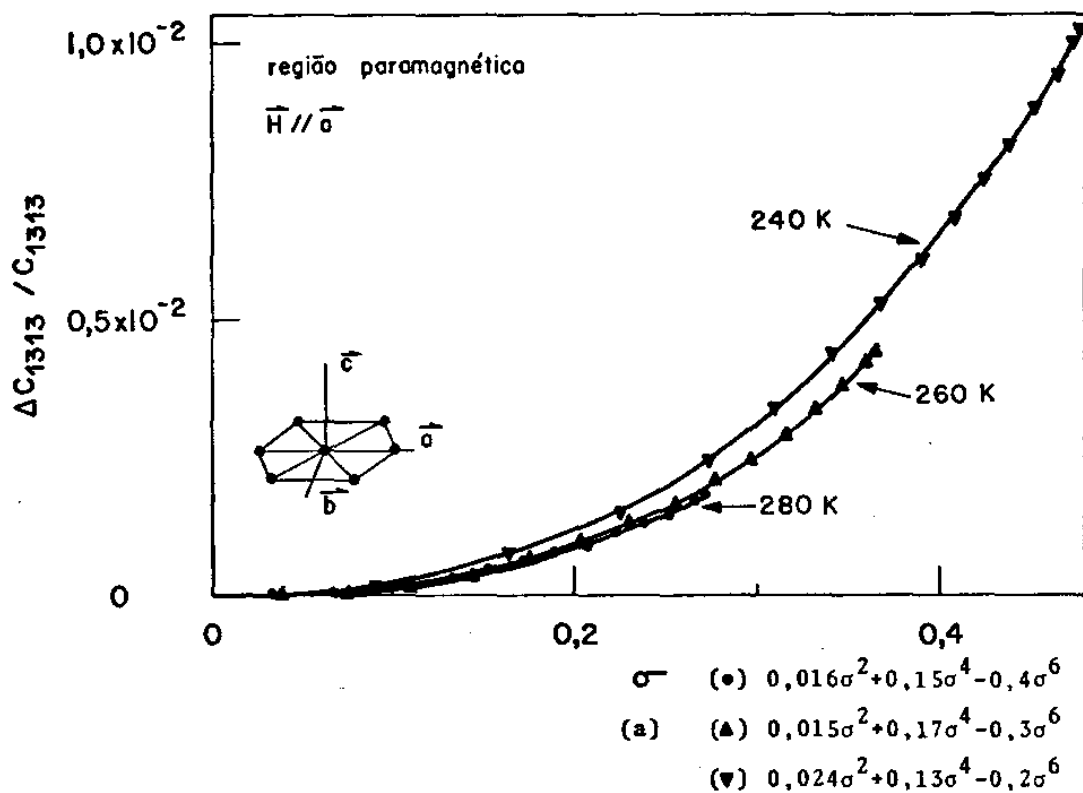
5- C_{1313} - fig.(IV-6)

Na região paramagnética, a dependência de $C_{1313}(\vec{\sigma})$ com a temperatura é maior quando a direção do campo está no eixo c do que quando está no plano basal. Como com C_{3131} , também os termos em $\ell=2$ são os mais importantes. A importância relativamente grande dos termos em $\ell=4$ e 6 para \vec{H}/\vec{c} em C_{1313} e C_{3131} não pode ser tomada como indicativa da participação efetiva destes termos, pois devido a pequena dependência com $\vec{\sigma}$, não é claro que o ajuste pelo método de mínimos quadrados seja apropriado para esta análise.

Estes resultados permitem uma análise da diferença no comportamento de C_{1313} e C_{3131} quando a direção do campo é a mesma (fig.(IV-7)). A contribuição da energia elástica de 3ª ordem é a mesma para C_{1313} e C_{3131} e a eq.(III-91) mostra que um termo rotacional de 1ª ordem nas deformações e 2 termos de 2ª ordem para \vec{H}/\vec{a} e 1 para \vec{H}/\vec{c} são responsáveis pela não degenerescência entre $C_{1313}(\vec{\sigma})$ e $C_{3131}(\vec{\sigma})$. A hamiltoniana magnetoelástica de 1 íon e de 1ª ordem nas deformações ($\bar{H}_{me}^{I,1}$ -eq.(III-52)) mostra que há outros termos rotacionais de 1ª ordem que podem contribuir para um comportamento deste tipo. Estes termos são:

$$\sqrt{20}P_4^0\omega_2^\epsilon Q_{41}^+(\vec{J}) + \sqrt{42}P_6^0\omega_2^\epsilon Q_{61}^+(\vec{J}) - \sqrt{3}P_6^6\omega_2^\epsilon Q_{65}^+(\vec{J})$$

Entretanto, os ajustes dos resultados experimentais com as potências de σ^ℓ indicam que os termos com $\ell>2$ são bastante menos importantes. Isto aliado a evidência da importância da interação magnetoelástica de 2ª ordem, mostrada no comportamento de C_{2121} e C_{3131} com campo aplicado no plano basal, é indicativo de que as principais contribuições para as diferenças entre C_{1313} e C_{3131} são devidas ao termo rotacional com $\ell=2$ e aos termos de 2ª ordem



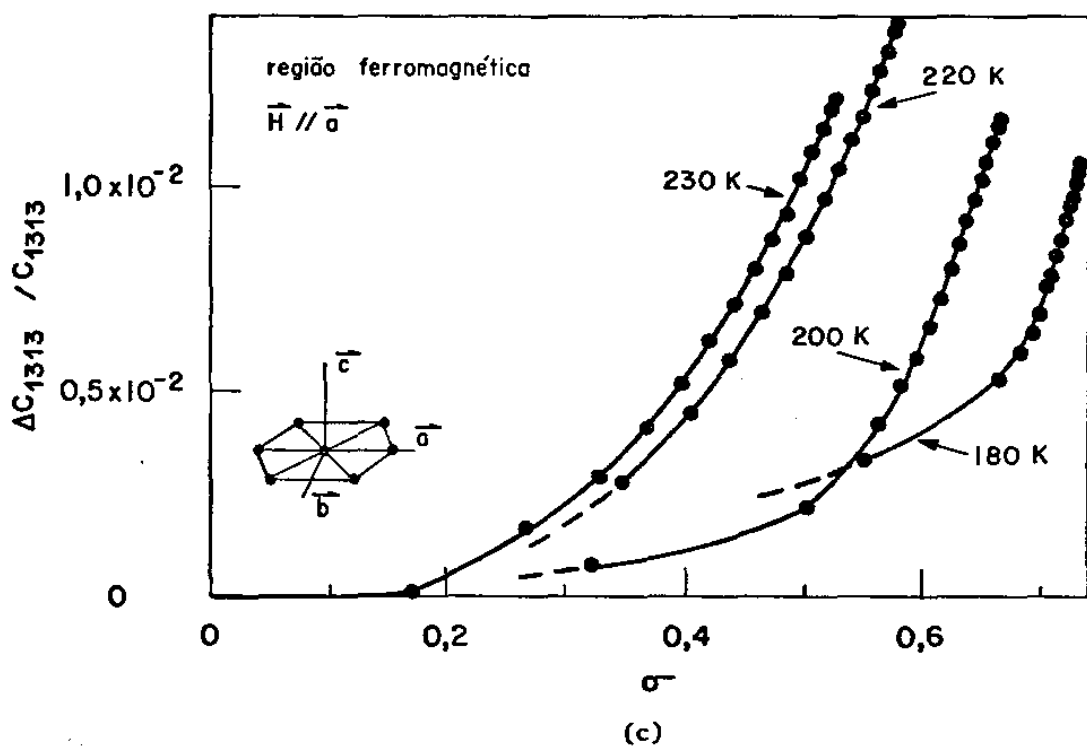
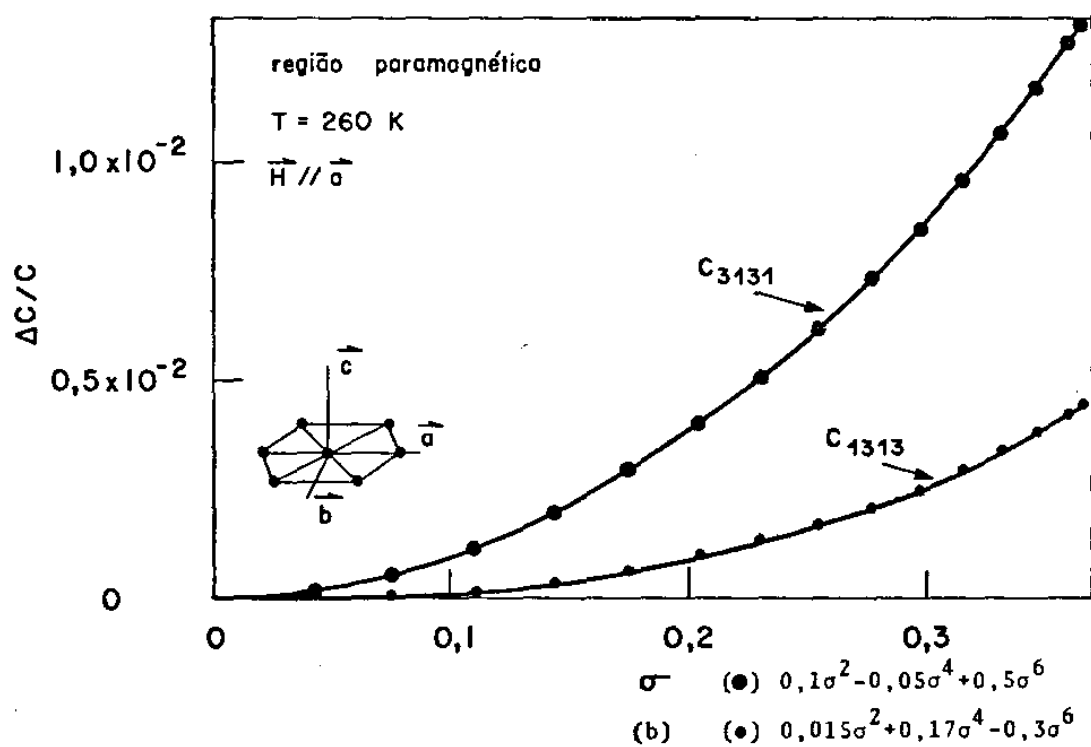
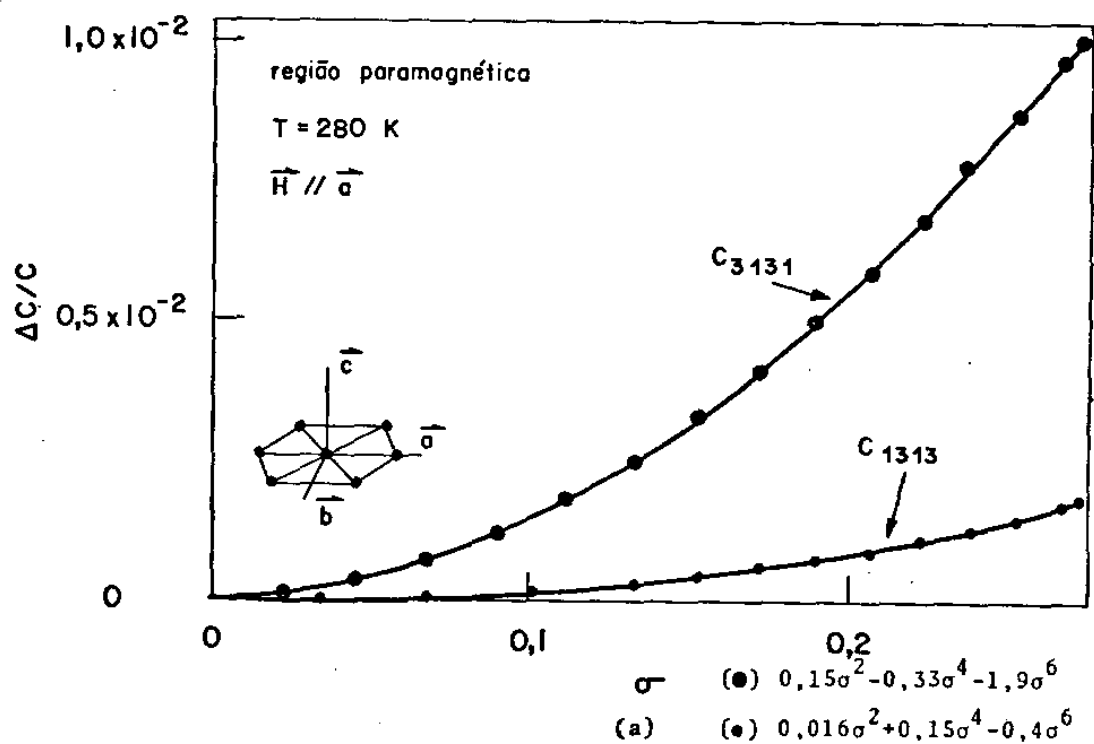


Fig.(IV-6) - Comportamento de C_{1313} com a Magnetização.



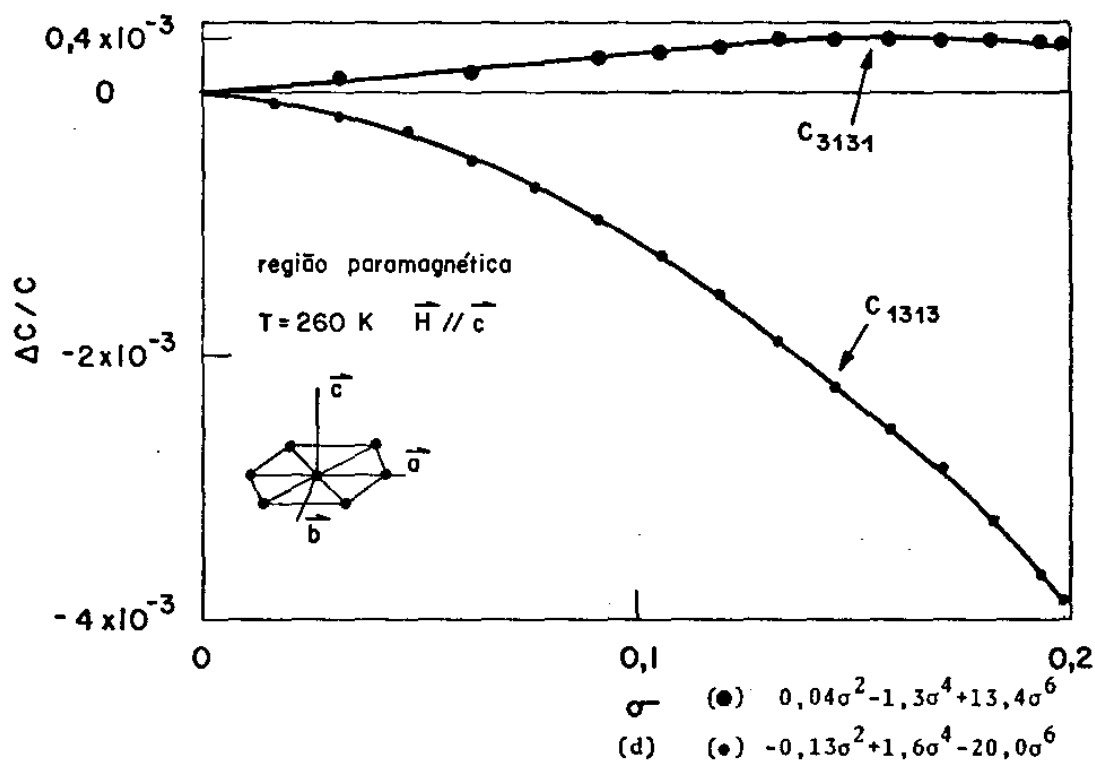
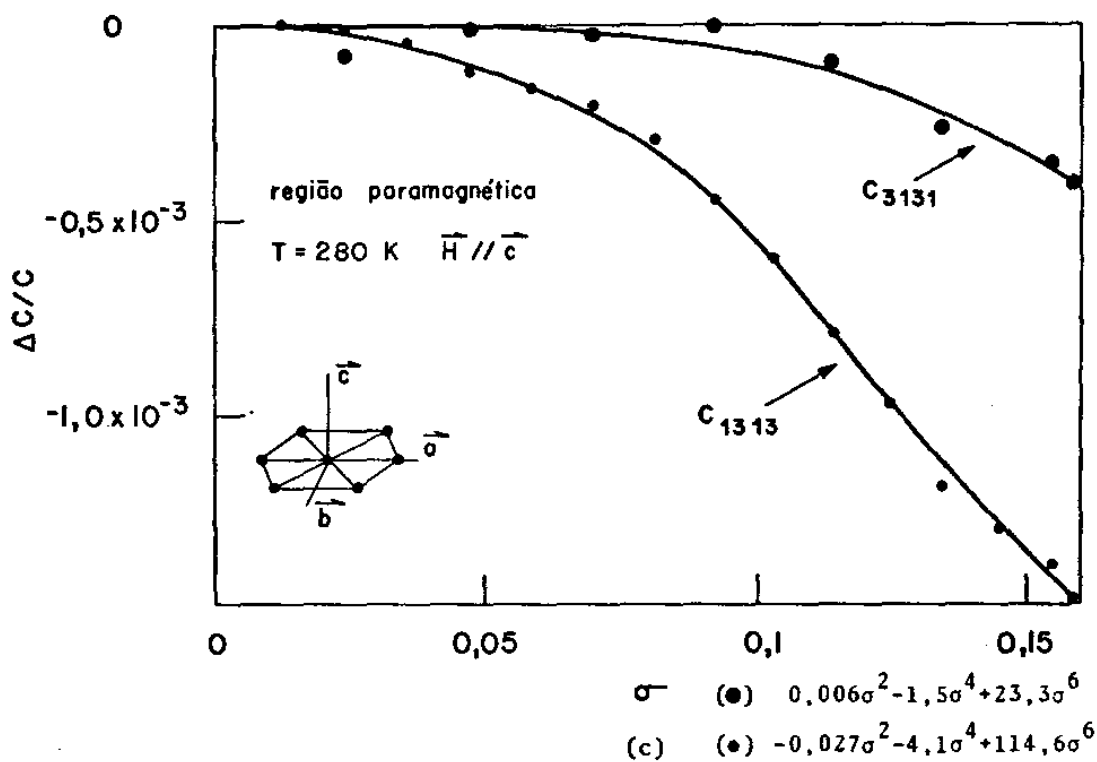


Fig.(IV-7) - Diferença Entre $C_{1313}(\vec{\sigma})$ e $C_{3131}(\vec{\sigma})$ Para $\vec{H} // \vec{a}$ e $\vec{H} // \vec{c}$.

nas deformações, ainda com $\ell=2$.

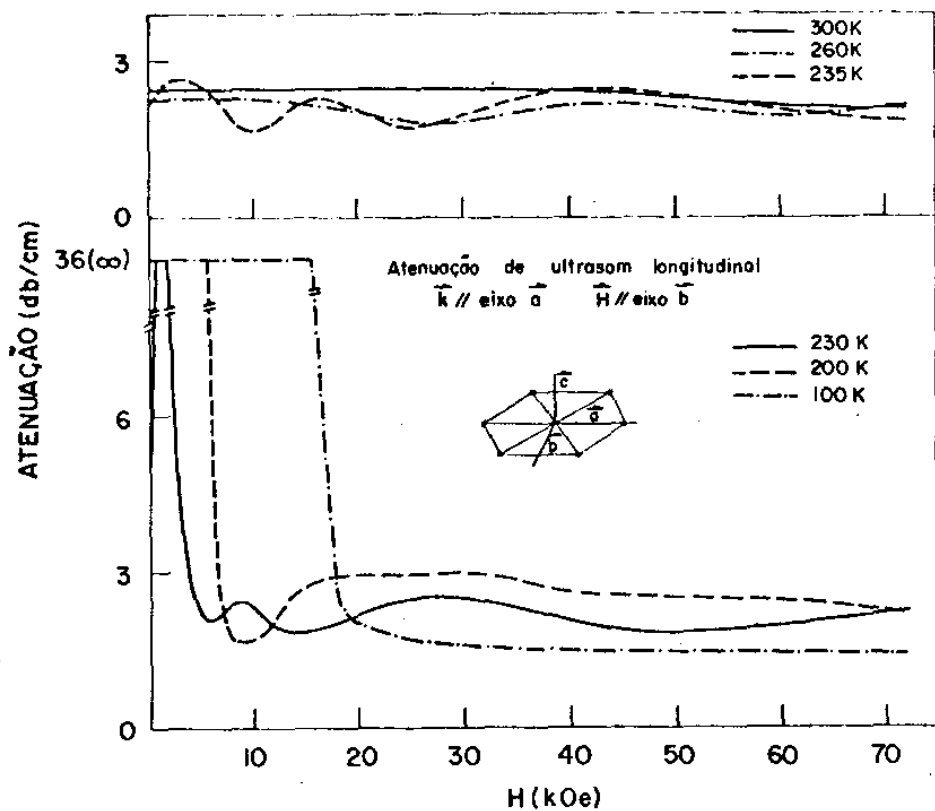
IV.2 - Comportamento da Atenuação -

O comportamento da atenuação do ultrassom usado nas medidas de constantes elásticas, como função do campo magnético, é mostrado na fig.(IV-8), em várias temperaturas. A atenuação medida foi sempre o resultado da comparação logarítmica de dois ecos vizinhos. Em temperaturas próximas e abaixo das transições de fase, os erros de medição foram maiores, devido a um comportamento nem sempre exponencial da envoltória de ecos.

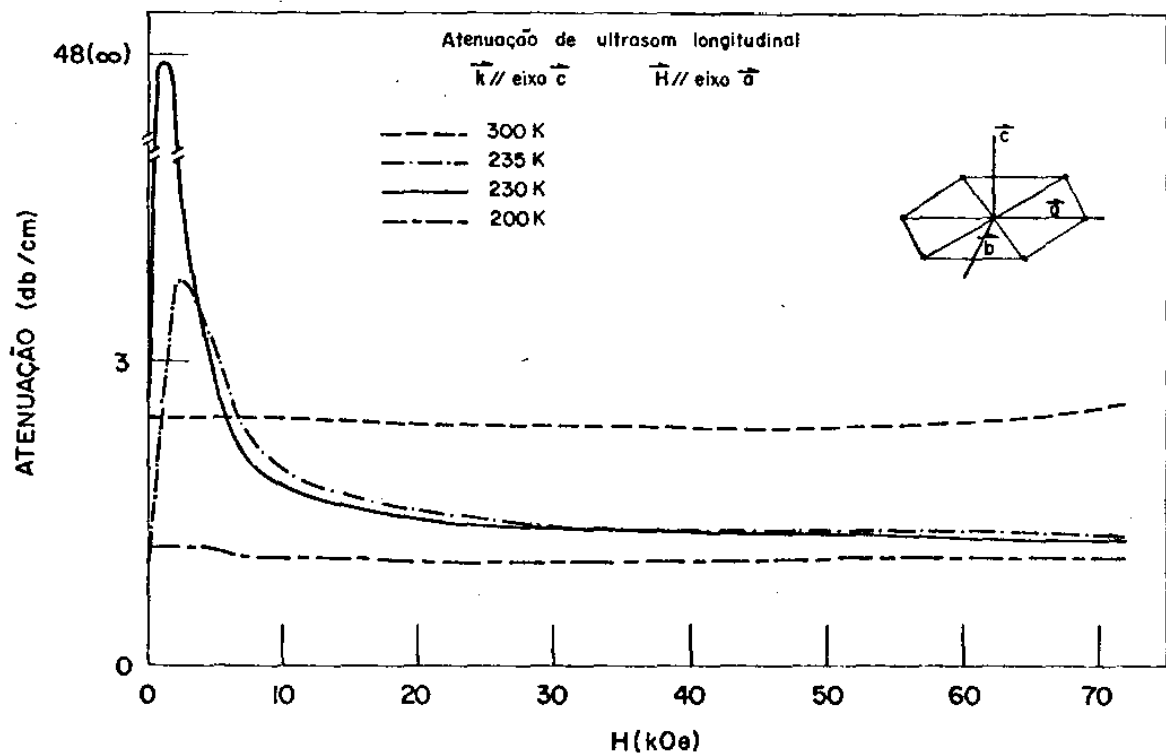
Além da viscosidade presente em todos os materiais, há outros mecanismos de atenuação nas terras raras pesadas. Provavelmente, o mais efetivo deles é o mecanismo de flutuação de spin, como proposto por Pollina e Luthi⁶⁴ e Maekawa et al.⁶⁵, pois a magnetização local deve depender das deformações dinâmicas. Na região ferromagnética, a atenuação por paredes entre domínios e por interação fonon-magnon pode ser forte também. As paredes entre domínios são regiões de cerca de 100 distâncias interatômicas de extensão, onde os momentos magnéticos localizados variam gradativamente a sua direção, o que as torna fortemente atenuantes, pelo mecanismo de flutuação de spin.

As figs.(IV-8a e 8b) mostram a atenuação do ultrassom longitudinal como função do campo magnético, aplicado no plano basal. Nas temperaturas próximas as transições de fase, o mecanismo de flutuação de spin é bastante efetivo. Na região ferromagnética, a atenuação devida a paredes entre domínios é muito forte para ultrassom propagando na direção \vec{a} (\vec{k}/\vec{a}), até que seja atingido um campo suficiente para alinhar os domínios da amostra. Isto indica que há uma maior densidade de paredes na direção \vec{c} do que na direção \vec{a} , pois a atenuação de ondas com \vec{k}/\vec{c} é normal.

O comportamento da atenuação do ultrassom transversal com campo no plano basal, mostra as mesmas características do lon



(a)



(b)

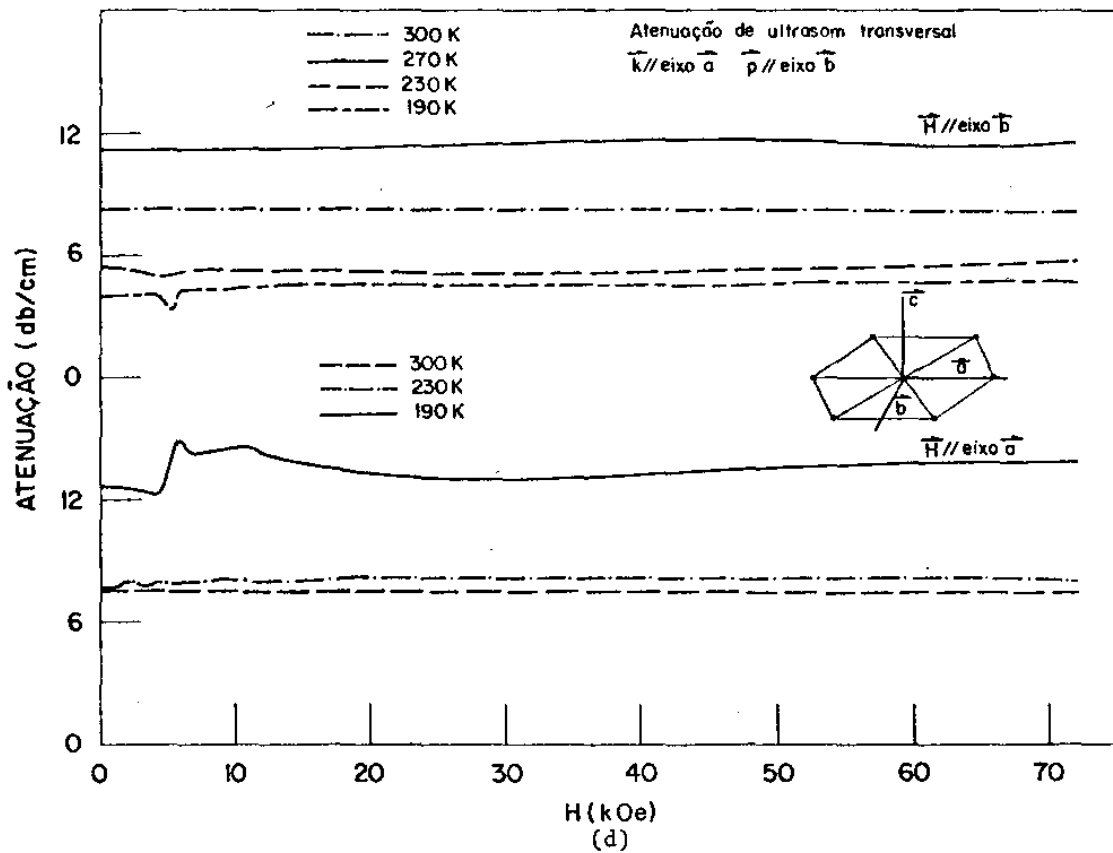
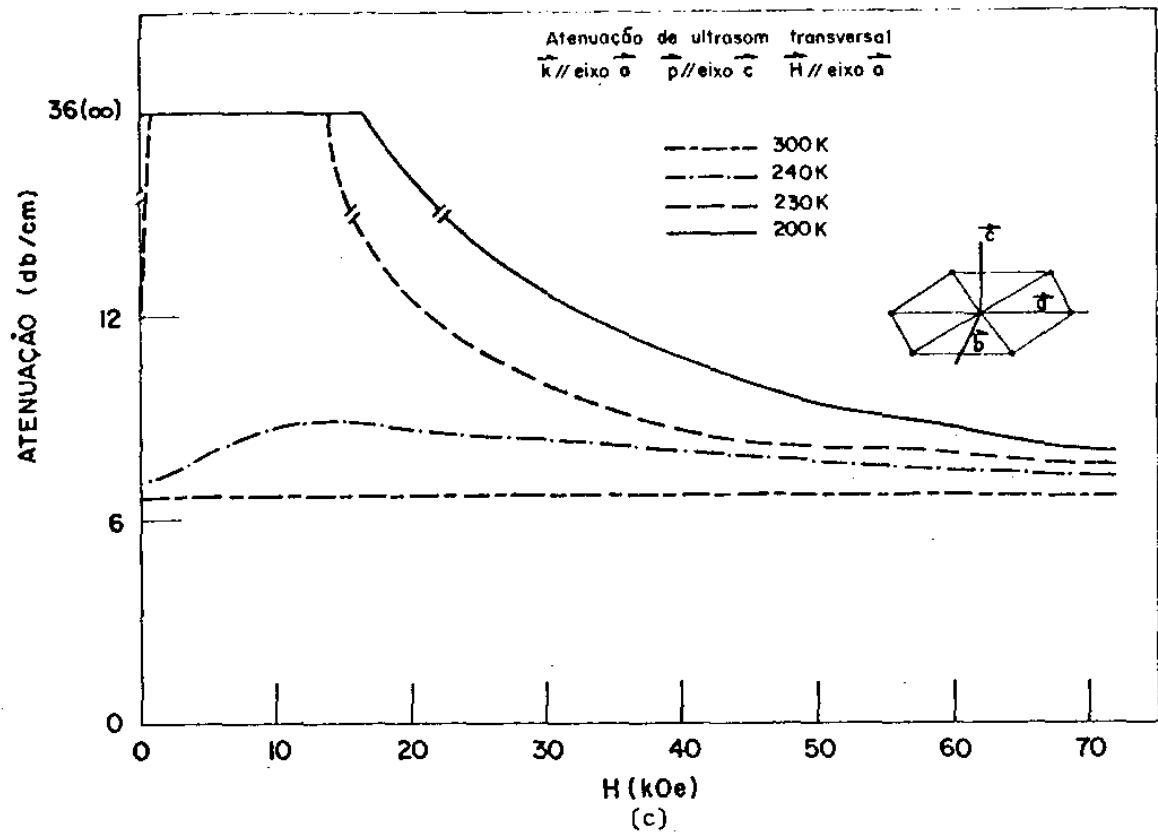


Fig.(IV-8) - Comportamento da Atenuação de Ultrassom com o Campo Magnético.

gitudinal (figs.(IV-8c e 8d)). Entretanto, as ondas com \vec{k}/\vec{a} e \vec{p}/\vec{b} não são fortemente atenuadas na região ferromagnética em campo baixo, como ocorre quando \vec{p}/\vec{c} ou com ondas longitudinais com \vec{k}/\vec{a} . Isto é devido provavelmente a uma situação geométrica, em que estas ondas ($\vec{k}/\vec{a}, \vec{p}/\vec{b}$) são pouco atenuadas por flutuação de spin, nas paredes entre domínios.

A atenuação com \vec{H}/\vec{c} , tanto de ondas longitudinais como de transversais, não depende muito do valor de \vec{H} , em temperaturas maiores do que 230 K.

Abaixo desta temperatura a atenuação foi sempre muito forte, impedindo mesmo as medições da velocidade do som.

IV.3 - Medidas de Magnetização -

A fig.(IV-9) mostra as curvas de magnetização reduzida contra campo, aplicado nos eixos b ou c, em algumas temperaturas. Estes resultados, inclusive os com campo no eixo a, foram correlacionados com as constantes elásticas e aparecem no apêndice C. A magnetização de saturação foi considerada aquela medida a 4,2 K em campo de 60 kOe. O valor obtido, $325,1 \pm 3$ emu/g, é bastante próximo do medido por Hegland et al.⁶⁶ (328 ± 3 emu/g).

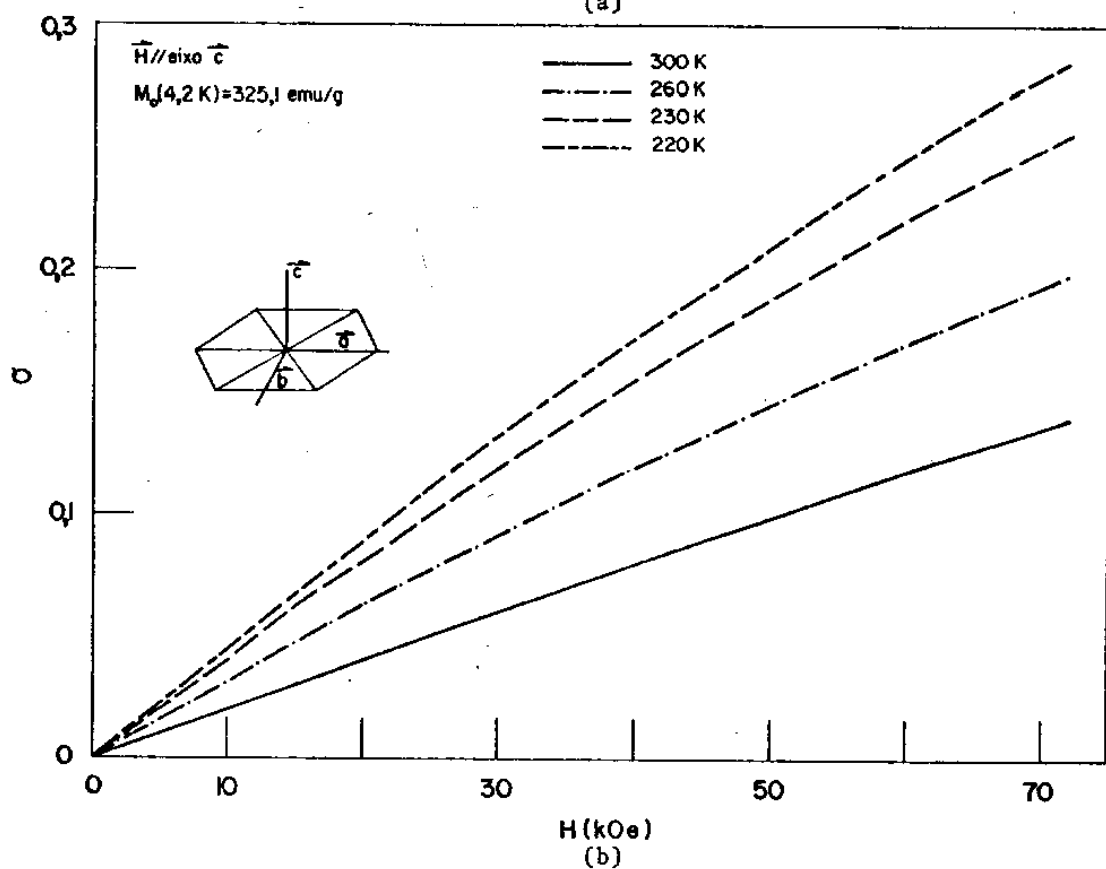
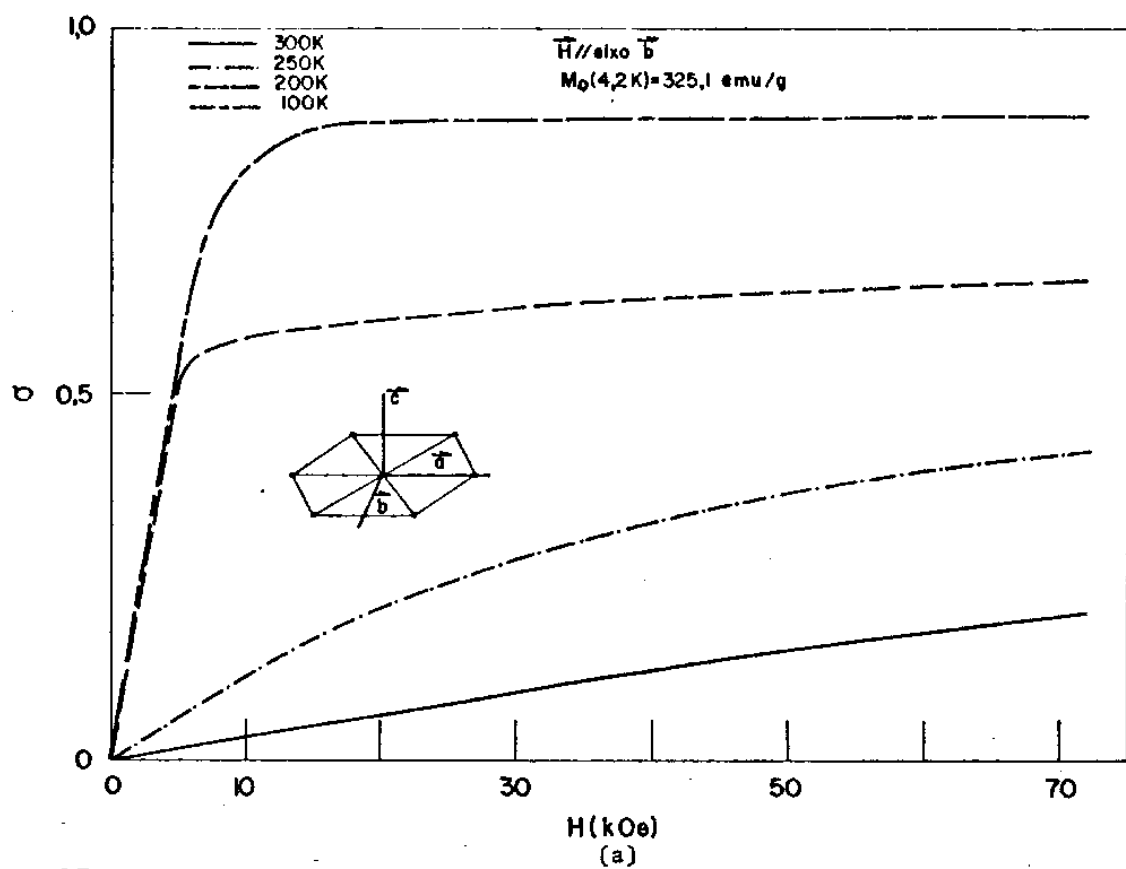


Fig.(IV-9) - Curvas de Magnetização Para $\vec{H} // \vec{b}$ e $\vec{H} // \vec{c}$.

CAPÍTULO V

ANÁLISE NUMÉRICA DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Neste capítulo nós descrevemos o método numérico usado para calcular algumas das quantidades do modelo teórico, como susceptibilidade magnética, magnetoestrições de equilíbrio, energia livre e as suas derivadas. Tendo calculado estas quantidades, como função da magnetização e da temperatura, nós podemos usar as expressões da seção (III.4) para compara-las com os resultados experimentais de $\Delta C(\vec{\sigma})/C$. Neste sentido, muitas aproximações tiveram que ser feitas e não podemos pretender, em princípio, a validade quantitativa no cálculo das constantes de acoplamento magnetoelástico. No entanto, veremos que este cálculo permite uma descrição qualitativa muito boa do comportamento experimental de todas as constantes elásticas medidas.

No modelo numérico, nós tratamos com dois conjuntos de constantes magnetoelásticas. O primeiro é o que entra na hamiltoniana de ordem zero e serve para o cálculo das grandezas termodinâmicas supra-citadas. Ele pode ser escolhido de modo a que as propriedades magnéticas e magnetoelásticas estáticas medidas experimentalmente, sejam reproduzidas teoricamente. O segundo é o que entra nas expressões da seção (III.4) para o cálculo das constantes elásticas. Teoricamente estes dois conjuntos são iguais, mas na prática, é muito difícil de verificar esta validade. É que as interações de ordem superior nas deformações - interação magnetoelástica de 2ª ordem e energia elástica de 3ª ordem - que efetivamente contribuem para o comportamento das constantes elásticas com a magnetização, contribuem muito pouco para o valor das deformações estáticas, e para uma escolha realista das constantes magnetoelásticas de H_0 , nós desprezamos estas interações.

Nós usamos em H_0 um conjunto de constantes magnetoelásticas de 1ª ordem que permite a reprodução dos resultados experi-

mentais (nossos e da literatura) de magnetização e de magnetoestrições estáticas. Esta H_0 permite o cálculo de F e suas derivadas e com estas funções e as expressões da seção (III.4), podemos escolher o conjunto de constantes magnetoelásticas que melhor reproduz os resultados experimentais de $\Delta C(\vec{\sigma})/C$.

Nós aplicamos este modelo apenas na região paramagnética.

V.1 - O Modelo Numérico -

Vamos inicialmente mencionar as principais aproximações e características do modelo numérico*:

1- A parte magnetoelástica de H_0 inclui apenas os termos de 1ª ordem nas deformações e de grau até $\ell=2$ nos operadores de momento angular. Assim, através do ajuste dos resultados experimentais de magnetoestrição estática da literatura ($\bar{e}^{\alpha,1}$, $\bar{e}^{\alpha,2}$ e \bar{e}_1^{γ}), pode ser feita uma estimativa das constantes magnetoelásticas de 1ª ordem, embora elas "englobassem" as de 2ª ordem e as de ordem superior nos operadores de momento angular.

2- A energia elástica de 3ª ordem foi desprezada no modelo numérico.

3- $G^{\epsilon,2}$ e $G^{\gamma,2}$ foram supostos nulos, porque não há resultados experimentais que permitam a sua determinação inequívoca**.

4- A fase antiferromagnética helicoidal não é incluída.

5- $C_{12}^{\alpha} = (C_{33} - C_{11} + C_{13} - C_{12})/9$ é muito menor do que as outras C_{jj}^{Γ} das eqs.(III-10) e foi desprezada.

6- A magnetização é calculada no plano x-z onde x representa uma

*O modelo numérico, programas e subrotinas (FORTRAN IV) foram inicialmente elaborados por P. L. Donoho. Os programas estão listados no apêndice D, com adaptações que facilitam a manipulação dos resultados no sistema DEC-10 da Unicamp.

**Rhyne e Legvold²⁵ desprezam a interação magnetoelástica de 2 íons na interpretação dos seus resultados experimentais de magnetoestrição.

direção do plano basal e z a direção do eixo hexagonal. A simulação da direção do plano basal escolhida se dá pela escolha da constante de anisotropia P_6^6 .

7- A magnetização reduzida e as magnetoestrições estáticas são calculadas autoconsistentemente.

8- Os operadores tensoriais foram definidos no programa sem os fatores irracionais e algumas das constantes que aparecem também diferem, por fatores constantes, das do modelo teórico. Estas diferenças são mostradas no apêndice E.

9- As energias são expressas em K; as densidades de energia, constantes elásticas e magnetoelásticas em K/íon*. Os campos magnéticos em kOe.

Por facilidade computacional, é conveniente agrupar todos os termos que multiplicam uma determinada componente do momento angular ou um operador tensorial. x e y são duas direções ortogonais do plano basal e como nós consideramos que a magnetização só pode estar no plano x-z, $\sigma_y = 0$. Assim, podemos combinar as interações de troca, de Zeeman e magnetoelástica de 2 íons e escrever:

$$H_{tr}^{is} + H_{tr}^{an} + H_z + \tilde{H}_{me}^{II} = \alpha_x J_x + \alpha_z J_z \quad (V-1)$$

Os coeficientes α_x e α_z podem ser escritos como:

$$\alpha_x = QH_x + \Gamma_x \sigma_x \quad (V-2)$$

$$\alpha_z = QH_z + \Gamma_z \sigma_z \quad (V-3)$$

onde

$$Q = 1000g\mu_B/k \quad (V-4)$$

e Γ_x e Γ_z incluem, cada um, um termo de campo molecular e outro de interação magnetoelástica de 2 íons:

*Para o térbio, $10^{11} \text{ dyn/cm}^2 = 2,3143 \times 10^4 \text{ K/íon}$.

$$\Gamma_x = (g\mu_B/k) (\Gamma - \Gamma_1) + J [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) \bar{e}^{\alpha,1} + (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) \bar{e}^{\alpha,2}] \quad (V-5)$$

$$\Gamma_z = (g\mu_B/k) (\Gamma + 2\Gamma_1) + J [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) \bar{e}^{\alpha,1} + (G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2}) \bar{e}^{\alpha,2}] \quad (V-6)$$

Agora, considerando a interação magnetoelástica de 1 íon até ordem $\ell=2$ nos operadores tensoriais, e até 1ª ordem nas deformações, a hamiltoniana de ordem zero fica:

$$H_0(i) = \alpha_x J_x + \alpha_z J_z + (P_2^0 - B_1^{\alpha,2} \bar{e}^{\alpha,1} - B_2^{\alpha,2} \bar{e}^{\alpha,2}) Q_2^0(\vec{J}_i) + P_4^0 Q_4^0(\vec{J}_i) + P_6^0 Q_6^0(\vec{J}_i) + P_6^6 Q_{66}^+(\vec{J}_i) - B_1^{\gamma,2} \bar{e}_1^{\gamma} Q_{22}^+(\vec{J}_i) \quad (V-7)$$

onde foram desprezados os termos de $\bar{H}_{me}^{I,1}$ envolvendo as deformações desconhecidas experimentalmente: e_1^E , e_2^E , ω_1^E , ω_2^E e e_2^Y . A forma da hamiltoniana perturbativa é a mesma da eq.(III-66):

$$H_{me}^{rf}(i) = A Q_2^0(\vec{J}_i) + B Q_{22}^+(\vec{J}_i) + C Q_{22}^-(\vec{J}_i) + D Q_{21}^+(\vec{J}_i) + E Q_{21}^-(\vec{J}_i) + J \sigma_x P J_x + J \sigma_z Q J_z \quad (V-8)$$

V.2 - Computação das Quantidades Termodinâmicas do Modelo -

O objetivo principal deste cálculo é, para cada temperatura, em vários valores de campo magnético, obter os valores da magnetização, das deformações estáticas e das derivadas primeiras e segundas de F.

A magnetização reduzida é definida por:

$$= \frac{1}{J} \frac{\sum_{m=-J}^J \langle m | J | m \rangle e^{-\beta E_m}}{\sum_{m=-J}^J e^{-\beta E_m}} \quad (V-9)$$

e deve ser calculada de um modo autoconsistente, pois como H_0 depende de $\vec{\sigma}$, $E_m = E_m(\vec{\sigma})$. Considerando apenas situações experimentais em que o campo magnético é aplicado no plano basal ou na direção \vec{c} , há duas equações (eqs.(V-2) ou (V-3) e eq.(V-9)) relacionando 3 variáveis: α_x (ou α_z), H_x (ou H_z) e σ_x (ou σ_z). O cálculo de $\vec{\sigma}$ é fácil quando $\vec{\alpha}$ é a variável independente. $\vec{\alpha}$ é colocada em H_0

que, diagonalizada, fornece os autovalores e os autovetores que entram no cálculo de $\vec{\sigma}$. \vec{H} pode então ser obtido das eqs.(V-2) e (V-3) como:

$$H_x = (\alpha_x - \Gamma_x \sigma_x) / Q \quad (V-10)$$

$$H_z = (\alpha_z - \Gamma_z \sigma_z) / Q \quad (V-11)$$

A consideração de \vec{H} como variável independente facilita a aplicação dos resultados na comparação com os resultados experimentais e foi preferida. Entretanto, isto requer um processo iterativo de cálculo. Inicialmente, independente do valor de \vec{H} em que se quer conhecer $\vec{\sigma}$, um valor de $\vec{\sigma}$ é suposto, e consequentemente, um de $\vec{\alpha}$. A hamiltoniana é então diagonalizada e $\vec{\sigma}$ calculada pela eq.(V-9), e obtemos um novo \vec{H} (digamos \vec{H}') das eqs.(V-10) ou (V-11). \vec{H}' pode ou não coincidir com \vec{H} . o objetivo da iteração é obter um novo valor de $\vec{\alpha}$, que colocado em H_0 , forneça um novo \vec{H} convergente para o valor de \vec{H} desejado. Nós usamos o método das tangentes de Newton⁶⁷ para resolver as seguintes equações:

$$F_x(\sigma_x) = [(\alpha_x - QH_x) / \Gamma_x] - \sigma_x = 0 \quad (V-12)$$

$$F_z(\sigma_z) = [(\alpha_z - QH_z) / \Gamma_z] - \sigma_z = 0 \quad (V-13)$$

F_x e F_z são funções de erro e a iteração cessa quando estas funções se anulam, dentro de uma certa tolerância, e obtemos o valor de $\vec{\sigma}$ correspondente a \vec{H} . O método requer uma suposição inicial no valor de $\vec{\sigma}$. Chamando de ξ a variável

$$\xi = \sigma_n + h_n \quad (V-14)$$

e expandindo $F(\xi)$ em série de Taylor, mantendo só a primeira derivada, temos:

$$F(\sigma_n + h_n) \approx F(\sigma_n) + h_n F'(\sigma_n) \quad (V-15)$$

Para que a função de erro se anule,

$$h_n = - F(\sigma_n)/F'(\sigma_n) \quad (V-16)$$

Colocando este h_n na eq.(V-14), obtemos a próxima aproximação da raiz:

$$\sigma_{n+1} = \sigma_n - F(\sigma_n)/F'(\sigma_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (V-17)$$

A iteração prossegue até que F_x e F_z se anulem, dentro de uma tolerância escolhida, que foi de -10^{-6} .

O cálculo das deformações de equilíbrio requer também um procedimento autoconsistente, já que elas são calculadas através de F , que por sua vez é função das deformações. Nós calculamos apenas $\bar{e}^{\alpha,1}$, $\bar{e}^{\alpha,2}$ e \bar{e}_1^{γ} porque já foram medidas experimentalmente²⁵, o que permite a comparação e o ajuste dos resultados.

Inicialmente, as deformações de equilíbrio são supostas nulas. A hamiltoniana é então construída, diagonalizada, e a magnetização e a energia livre são calculadas. As deformações estáticas são então encontradas pelo conjunto de equações:

$$(\partial F_{el}/\partial e_i^{\Gamma,j}) + (\partial F_{me}/\partial e_i^{\Gamma,j}) = 0 \quad (V-18)$$

onde F_{el} inclui a parte puramente elástica e F_{me} (até aqui designada apenas por F) inclui a parte de origem magnetoelástica. As derivadas de F_{el} são obtidas da eq.(III-9) e as de F_{me} são obtidas numericamente, isto é, dando pequenos incrementos aos $e_i^{\Gamma,j}$ e calculando como $\Delta F_{me}/\Delta e_i^{\Gamma,j}$. As deformações assim encontradas são incluídas na nova hamiltoniana de ordem zero, através de novos valores de Γ_x e Γ_z (eqs.(V-5) e (V-6)) e dos coeficientes de $Q_2^0(\vec{J})$ e $Q_{22}^+(\vec{J})$ na eq.(V-7), quais sejam: $-(B_1^{\alpha,2}\bar{e}^{\alpha,1} + B_2^{\alpha,2}\bar{e}^{\alpha,2})$ e $-B_1^{\gamma,2}\bar{e}_1^{\gamma}$. A nova H_0 é então diagonalizada e as novas deformações de equilíbrio são encontradas com a eq.(V-18). A iteração prosse-

gue até que as deformações de equilíbrio coincidam, dentro de uma tolerância, com as calculadas na iteração anterior.

As derivadas primeiras e segundas de F relativas aos coeficientes A, B, C, D, E, P e Q (vamos generaliza-los por X_r ($r=1,7$)) podem ser calculadas a partir da própria definição de F (ou F_{me}):

$$F = -kT \ln Z = -kT \ln \sum_{m=-J}^J e^{-\beta E_m} \quad (V-19)$$

como:

$$(\partial F / \partial X_r) |_{H,T,\bar{e}_i^{\Gamma,j}} = \left[\sum_{m=-J}^J (\partial E_m / \partial X_r) e^{-\beta E_m} \right] / Z \quad (V-20)$$

$$\begin{aligned} (\partial^2 F / \partial X_r \partial X_s) |_{H,T,\bar{e}_i^{\Gamma,j}} &= \left[\sum_{m=-J}^J (\partial^2 E_m / \partial X_r \partial X_s) e^{-\beta E_m} \right] / Z \\ &- \beta \left[\sum_{m=-J}^J (\partial E_m / \partial X_r) (\partial E_m / \partial X_s) e^{-\beta E_m} \right] / Z \\ &+ \beta \left[\sum_{m=-J}^J (\partial E_m / \partial X_r) e^{-\beta E_m} \right] \left[\sum_{m=-J}^J (\partial E_m / \partial X_s) e^{-\beta E_m} \right] / Z^2 \end{aligned} \quad (V-21)$$

onde $\beta=1/kT$ e E_m é a energia do autoestado $|Jm\rangle$ corrigida até 2ª ordem (eq.(III-64)). As derivadas de E_m relativas aos coeficientes X_r e as somatórias que aparecem nas eqs.(V-20) e (V-21), podem ser calculadas numêricamente, e as derivadas primeiras e segundas de F, que entram no cálculo das constantes elásticas, podem então ser conhecidas. H_{me}^{rf} inclui 5 operadores reais ($Q_2^0(\vec{J})$, $Q_{21}^+(\vec{J})$, $Q_{22}^+(\vec{J})$, J_x e J_z) e 2 imaginários ($Q_{21}^-(\vec{J})$ e $Q_{22}^-(\vec{J})$). Nós calculamos as correções de energia de 1ª e 2ª ordem (eqs.(III-61) e (III-62)) usando as autofunções de H_0 no sistema em que ela é diagonal, e as correções devem ser reais. Deste modo, só podemos calcular as derivadas primeiras relativas aos coeficientes dos 5 operadores reais, e as derivadas segundas relativas a coeficientes de 2 operadores do mesmo tipo. Mas estas incluem todas as necessárias a descrição das constantes elásticas com as expressões

da seção (III-4).

O cálculo das derivadas primeiras e segundas de F, a campo magnético constante, pode ser feito pelo uso das eqs.(V-20) e (V-21). Aqui, por facilidade computacional, nós calculamos as derivadas a magnetização constante e as relacionamos posteriormente com as a campo constante. Para fazer esta relação, nós escrevemos a energia livre como:

$$F = F[(H + \Gamma \vec{\sigma}), T, X_r (r=1,7)] \quad (V-22)$$

Como $\vec{\sigma}$ e F são funções das mesmas variáveis,

$$(\partial F / \partial X_r) |_{T,H} = (\partial F / \partial X_r) |_{T,\sigma} + (\partial F / \partial \sigma) |_{T,X_r} (\partial \sigma / \partial X_r) |_{T,H} \quad (V-23)$$

Para facilitar a computação numérica, é conveniente fazer com que H_{me}^{rf} (eq.(III-66)) seja escrita apenas em função dos operadores de momento angular, e então fazemos as seguintes condensações:

$$p = PJ\sigma_x \quad (V-24)$$

$$q = QJ\sigma_z \quad (V-25)$$

de modo que

$$H_{me}^{rf}(i) = AQ_2^0(\vec{J}_i) + BQ_{22}^+(\vec{J}_i) + CQ_{22}^-(\vec{J}_i) + DQ_{21}^+(\vec{J}_i) + EQ_{21}^-(\vec{J}_i) + pJ_x + qJ_z \quad (V-26)$$

As componentes da magnetização podem agora ser escritas como:

$$\sigma_x = - \frac{\langle J_x \rangle}{J} = - \frac{1}{J} \frac{\partial \langle H_{me}^{rf} \rangle}{\partial p} = - \frac{1}{J} \frac{\partial F}{\partial p} \Big|_T \quad (V-27)$$

$$\sigma_z = - \frac{\langle J_z \rangle}{J} = - \frac{1}{J} \frac{\partial \langle H_{me}^{rf} \rangle}{\partial q} = - \frac{1}{J} \frac{\partial F}{\partial q} \Big|_T \quad (V-28)$$

$\vec{\sigma}$ aparece no campo molecular como $\Gamma_x \sigma_x$ e $\Gamma_z \sigma_z$ e os coeficientes p e q, além do acoplamento magnetoelástico, devem incluir termos do tipo $\Gamma_x \sigma_x$ e $\Gamma_z \sigma_z$, respectivamente, onde σ_x e σ_z vem da dependência de $\vec{\sigma}$ com as deformações. Podemos então escrever

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_r} \right|_{T,H} &= - \frac{1}{J} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial X_r \partial p} \right) \Big|_{T,\sigma} + \frac{\partial^2 F}{\partial p^2} \Big|_{T,\sigma} \Gamma_x \left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_r} \right|_{T,H} \\ &= - (\partial^2 F / \partial X_r \partial p) \Big|_{T,\sigma} / [J + \Gamma_x \frac{\partial^2 F}{\partial p^2} \Big|_{T,\sigma}]\end{aligned}\quad (V-29)$$

e equivalentemente,

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial \sigma_z}{\partial X_r} \right|_{T,H} &= - \frac{1}{J} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial X_r \partial q} \right) \Big|_{T,\sigma} + \frac{\partial^2 F}{\partial q^2} \Big|_{T,\sigma} \Gamma_z \left. \frac{\partial \sigma_z}{\partial X_r} \right|_{T,H} \\ &= - (\partial^2 F / \partial X_r \partial q) \Big|_{T,\sigma} / [J + \Gamma_z \frac{\partial^2 F}{\partial q^2} \Big|_{T,\sigma}]\end{aligned}\quad (V-30)$$

Da eq. (V-23), para \vec{H} no plano basal e na direção \vec{z} , respectivamente, nós tiramos:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,H} = \left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,\sigma} + \left. \frac{\partial F}{\partial p} \right|_{T,\sigma} \Gamma_x \left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_r} \right|_{T,H} \quad (V-31)$$

e

$$\left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,H} = \left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,\sigma} + \left. \frac{\partial F}{\partial q} \right|_{T,\sigma} \Gamma_z \left. \frac{\partial \sigma_z}{\partial X_r} \right|_{T,H} \quad (V-32)$$

Usando agora as eqs. (V-27) e (V-28), obtemos:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,H} = \left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,\sigma} - J \sigma_x \Gamma_x \left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_r} \right|_{T,H} \quad (V-33)$$

e

$$\left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,H} = \left. \frac{\partial F}{\partial X_r} \right|_{T,\sigma} - J \sigma_z \Gamma_z \left. \frac{\partial \sigma_z}{\partial X_r} \right|_{T,H} \quad (V-34)$$

As derivadas segundas ficam:

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial^2 F}{\partial X_r \partial X_s} \right|_{T,H} &= \left. \frac{\partial^2 F}{\partial X_r \partial X_s} \right|_{T,\sigma} + \left. \frac{\partial^2 F}{\partial X_s \partial p} \right|_{T,\sigma} \Gamma_x \left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_r} \right|_{T,H} \\ &\quad - J \Gamma_x \left(\left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_r} \right|_{T,H} \left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_s} \right|_{T,H} \right) - J \sigma_x \Gamma_x \left. \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial X_r \partial X_s} \right|_{T,H}\end{aligned}\quad (V-35)$$

e

$$\left. \frac{\partial^2 F}{\partial X_r \partial X_s} \right|_{T,H} = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial X_r \partial X_s} \right|_{T,\sigma} + \left. \frac{\partial^2 F}{\partial X_s \partial q} \right|_{T,\sigma} \Gamma_z \left. \frac{\partial \sigma_z}{\partial X_r} \right|_{T,H} - J \Gamma_z \left(\left. \frac{\partial \sigma_z}{\partial X_r} \right|_{T,H} \left. \frac{\partial \sigma_z}{\partial X_s} \right|_{T,H} \right) - J \sigma_z \Gamma_z \left. \frac{\partial^2 \sigma_z}{\partial X_r \partial X_s} \right|_{T,H} \quad (V-36)$$

O cálculo de $(\partial^2 \sigma_x / \partial X_r \partial X_s) |_{T,H}$ e $(\partial^2 \sigma_z / \partial X_r \partial X_s) |_{T,H}$ requer correção de energia de 3ª ordem* e nós negligenciamos estes termos por serem provavelmente muito menores do que as derivadas primeiras de $\vec{\sigma}$.

V.3 - Determinação dos Parâmetros que Entram na Hamiltoniana de Ordem Zero -

Inicialmente, nós escolhemos as 4 constantes de campo cristalino (P_2^0 , P_4^0 , P_6^0 e P_6^6) e as constantes de campo molecular (Γ e Γ_1) que melhor reproduzissem o comportamento experimental da magnetização e as temperaturas de Curie $\theta_{||}$ ($\vec{H} // \vec{c}$) e θ_{\perp} ($\vec{H} \perp \vec{c}$)**.

*Uma vez que:

$$\left. \frac{\partial \sigma_x}{\partial X_s} \right|_{T,H} = [(\partial^2 F / \partial X_s \partial p) |_{T,\sigma}] / [J + \Gamma_x (\partial^2 F / \partial p^2) |_{T,\sigma}] , \text{ temos:}$$

$$\left. \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial X_r \partial X_s} \right|_{T,H} = - \frac{(\partial^3 F / \partial X_r \partial X_s \partial p) |_{T,\sigma} + (\partial \sigma_x / \partial X_s) \Gamma_x (\partial^3 F / \partial X_r \partial p^2)}{J + \Gamma_x (\partial^2 F / \partial p^2) |_{T,\sigma}}$$

o que mostra que as derivadas segundas de $\vec{\sigma}$ dependem das derivadas terceiras de F, que só podem ser calculadas conhecendo a correção de energia de 3ª ordem.

**A lei de Curie-Weiss aplicada a materiais ferromagnéticos anisotrópicos, pode ser expressa como:

$$\chi_{||} = C / (T - \theta_{||}) \quad \text{e} \quad \chi_{\perp} = C / (T - \theta_{\perp})$$

onde $\chi_{||}$ e χ_{\perp} são as susceptibilidades magnéticas com campo aplicado paralelo e perpendicular ao eixo c, respectivamente, e C é uma constante.

Posteriormente, escolhemos valores para as 7 constantes magnetoelásticas em questão, que reproduzissem os resultados experimentais de magnetoestrição na região paramagnética.

As constantes de campo cristalino e as de campo molecular foram escolhidas simultaneamente para reproduzir as curvas de magnetização contra campo, com campo aplicado nos eixos b e c, a 4,2 K, 250 K e 300 K, e as temperaturas de Curie $\theta_{||}$ e θ_{\perp} . As curvas de magnetização foram as obtidas experimentalmente* e os valores de $\theta_{||}$ e θ_{\perp} usados foram os de Aleonard et al.⁶⁸, 181 K e 236 K respectivamente, obtidos por extrapolação das curvas $1/\chi_{||}$ e $1/\chi_{\perp}$ contra temperatura, medidas entre 280 K e 360 K. A diferença $\theta_{||} - \theta_{\perp}$ é fortemente dependente de P_2^0 e as susceptibilidades fortemente dependentes de Γ . P_4^0 e P_6^0 contribuem para a curvatura no sentido da saturação das curvas $\vec{\sigma} \times \vec{H}$ e P_6^6 indica a pequena anisotropia do plano basal, na região paramagnética. Os valores que satisfizeram as condições propostas foram:

$$\begin{aligned}
 P_2^0 &= 1,08 \text{ K/íon} \\
 P_4^0 &= -4 \times 10^{-4} \text{ K/íon} \\
 P_6^0 &= 1 \times 10^{-7} \text{ K/íon} \\
 P_6^6 &= 2 \times 10^{-6} \text{ K/íon} \\
 \Gamma &= 938,5 \text{ kOe/íon} \\
 \Gamma_1 &= 0
 \end{aligned}
 \quad \text{ou equivalentemente} \quad
 \begin{aligned}
 \Gamma_x(e_i^{\Gamma}, j=0) &= 94,5 \text{ K/íon} \\
 \Gamma_z(e_i^{\Gamma}, j=0) &= 94,5 \text{ K/íon}
 \end{aligned}
 \tag{V-37}$$

As constantes magnetoelásticas foram ajustadas para reproduzir os resultados experimentais de magnetoestrição de Rhyne e Legvold²⁵ na região paramagnética, com \vec{H}/\vec{b} , supondo-se que as deformações estáticas sejam funções lineares das constantes

magnetoelásticas. As deformações irreduzíveis dependem apenas das

*Uma vez que \vec{H} nos programas é o campo magnético interno e na experiência o externo, e que não se conhecia o fator de demagnetização da amostra, escolhemos os parâmetros de modo que as magnetizações calculadas fossem cerca de 10% maiores do que as medidas.

constantes magnetoelásticas de mesmo índice. Expandindo então $e^{\alpha,1}$, $e^{\alpha,2}$ e e_1^Y em função das constantes magnetoelásticas relacionadas, para \vec{H}/\vec{b} , temos:

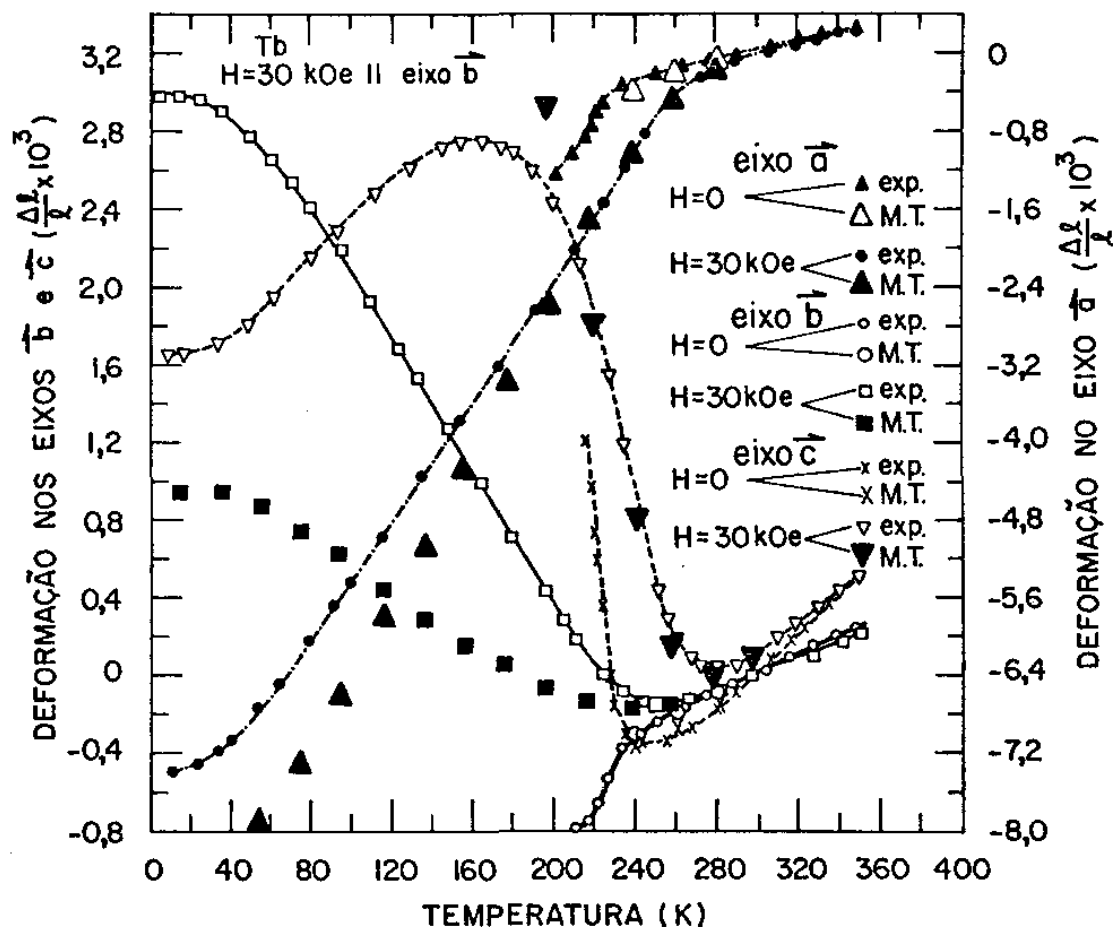
$$\bar{e}^{\alpha,1} = \frac{\partial \bar{e}^{\alpha,1}}{\partial B_1^{\alpha,2}} B_1^{\alpha,2} + \frac{\partial \bar{e}^{\alpha,1}}{\partial (G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2})} (G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) \quad (V-38)$$

$$\bar{e}^{\alpha,2} = \frac{\partial \bar{e}^{\alpha,1}}{\partial B_1^{\alpha,2}} B_2^{\alpha,2} + \frac{\partial \bar{e}^{\alpha,2}}{\partial (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})} (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) \quad (V-39)$$

$$\bar{e}_1^Y = \frac{\partial \bar{e}_1^Y}{\partial B^Y,2} B^Y,2 + \frac{\partial e_1}{\partial G^Y,2} G^Y,2 \quad (V-40)$$

As derivadas das deformações relativas as constantes magnetoelásticas podem ser calculadas numêricamente em uma versão um pouco modificada do programa principal (MAIN0)*. Assim, usando os resultados experimentais de Rhyne e Legvold²⁵, as eqs.(V-38), (V-39) e (V-40) podem ser usadas para determinar as constantes magnetoelásticas que nãlas aparecem, pelo método de mínimos quadrados. Isto foi feito em duas etapas. Inicialmente, $(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2})$ e $(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})$ foram supostos nulos e $B_1^{\alpha,2}$ e $B_2^{\alpha,2}$ encontrados por mínimos quadrados, para ajustar a magnetoestrição a campo nulo, na região paramagnética (fig.(V-1)). Nesta região, a campo nulo, não há interação de troca e os Gs podem ser desprezados. Posteriormente $(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2})$ e $(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})$ foram encontrados, por mínimos quadrados, para ajustar as partes conhecidas das eqs.(V-38) e (V-39), com os resultados experimentais de 2 temperaturas da região paramagnética, com campo aplicado. Uma vez que $G^Y,2$ foi suposto nulo, $B^Y,2$ também foi ajustado por mínimos quadrados, para reproduzir os resultados com campo aplicado. A fig.(V-2) mostra o resultado do ajuste nas duas temperaturas da região paramagnética. O cálculo

*Cada derivada \bar{e} é calculada considerando nulas todas as outras constantes magnetoelásticas.



M.T. + Modelo Teórico

Fig.(V-1) - Comparação das Deformações Magnetoestríctivas Medidas Experimentalmente com as Encontradas com o Modelo Teórico. $B_1^{\alpha,2}$ e $B_2^{\alpha,2}$, constantes magnetoelásticas de 1^o íon, foram encontradas pelo ajuste das curvas a campo zero. As outras constantes magnetoelásticas do modelo numérico foram encontradas pelo ajuste das curvas de deformação contra campo (fig.(V-2)). (Resultados experimentais da Ref. 25)

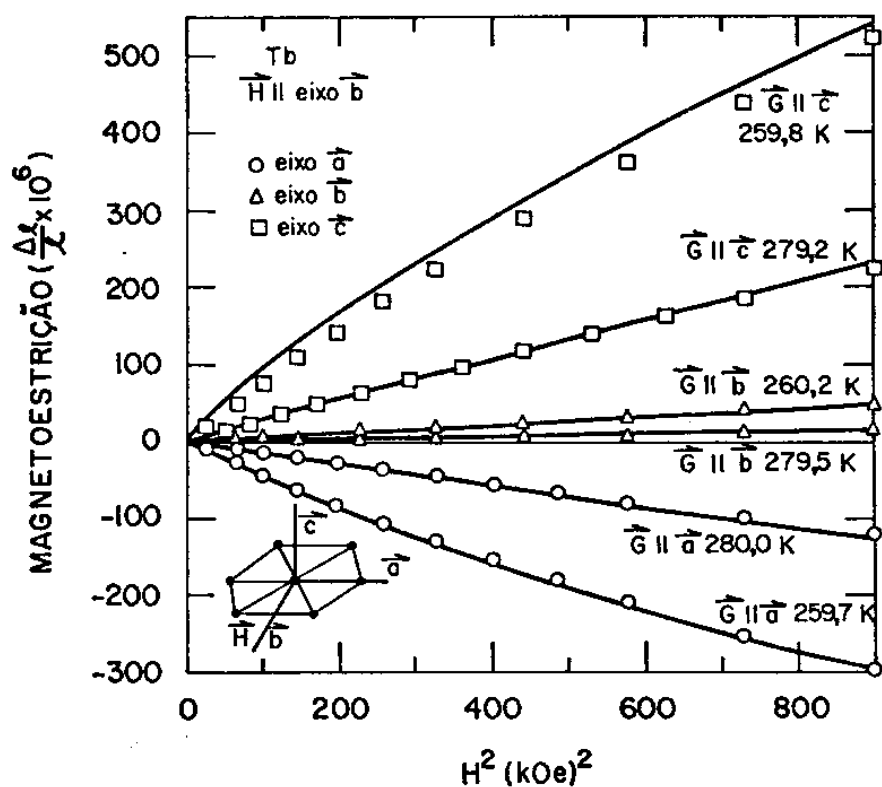


Fig.(V-2) - Ajuste das Magnetoestrições Isotérmicas na Região Paramagnética, com o Modelo Teórico. (Resultados Experimentais da Ref. 25)

lo das magnetoestrições a campo constante (fig.(V-1)) só dá bom resultado na região paramagnética, o que é esperado. Os valores obtidos para as constantes magnetoelásticas pelos ajustes, foram:

$$B_1^{\alpha,2} = -7,9 \text{ K/íon}$$

$$B_2^{\alpha,2} = -8,1 \text{ K/íon}$$

$$B^{\gamma,2} = 15,7 \text{ K/íon} \quad (V-41)$$

$$G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2} = 9,02 \text{ K/íon}$$

$$G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2} = 8,97 \text{ K/íon}$$

Os resultados de du Plessis de magnetoestrição⁶⁹ indicam para o térbio uma razão $(B^{\epsilon,2}/B^{\gamma,2})$ igual a 2,35, bastante diferente das outras terras raras. Assim, supusemos $B^{\epsilon,2} = 36,8 \text{ K/íon}$. Não há na literatura resultados experimentais de magnetoestrição com \vec{H}/\vec{C} , e não podemos determinar os valores de $(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2})$ e $(G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})$. Nós supusemos que estas combinações valem respectivamente 9,02 K/íon e 8,97 K/íon (os mesmos valores de $(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2})$ e $(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})$), o que é razoável, uma vez que não há anisotropia na interação de troca.

V.4 - Aplicação do Modelo Numérico ao Comportamento das Constantes Elásticas -

Com o sentido de tornar o modelo teórico numericamente aplicável, fizemos várias simplificações na hamiltoniana de ordem zero. Embora isto tenha sido suficiente para descrever razoavelmente o comportamento da susceptibilidade magnética e os resultados limitados de magnetoestrição da literatura, não podemos esperar uma grande precisão no cálculo das deformações estáticas e das derivadas de F. Equivalentemente, as constantes magnetoelásticas de 1ª ordem encontradas nos ajustes de magnetoestrição, não devem ser muito precisas. No entanto, veremos que com estas fun-

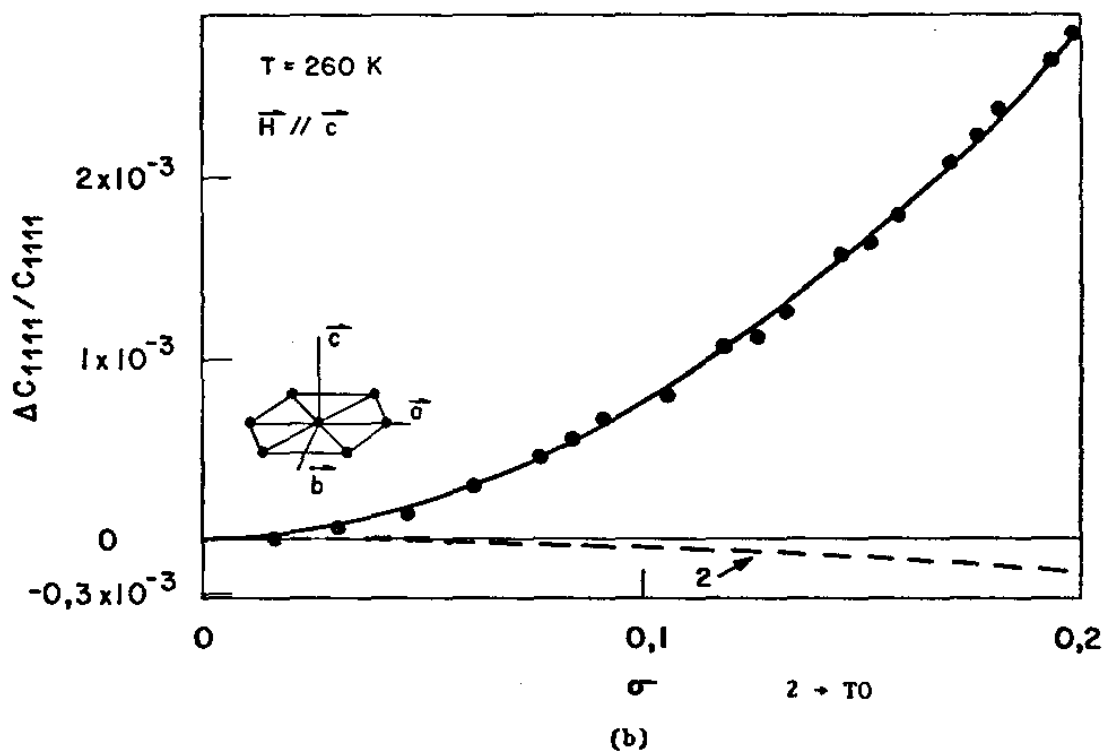
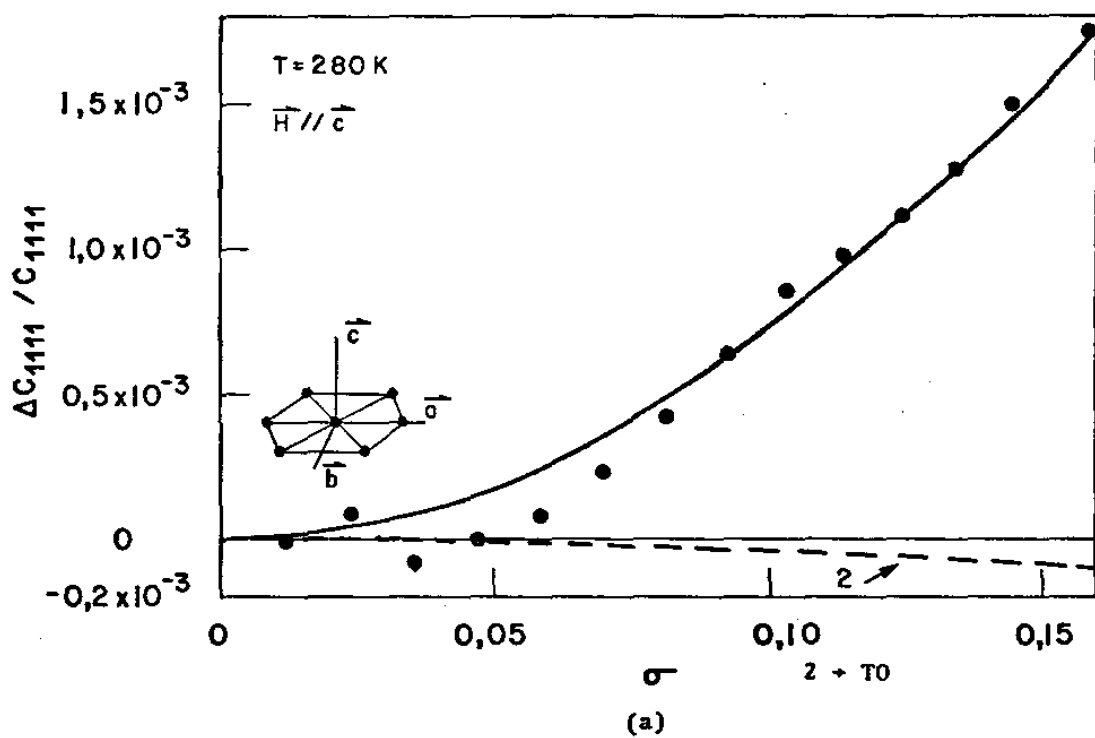
ções pudemos sempre dar uma descrição bastante aproximada do comportamento das constantes elásticas estudadas como função da magnetização, através do ajuste dos resultados.

Para os ajustes, nós usamos as expressões calculadas na seção (III.4). As constantes elásticas de 3ª ordem utilizadas são as calculadas por Rao e Ramanand⁴⁰*. O comportamento e a expressão teórica de cada constante elástica de 2ª ordem requer que elas sejam estudadas individualmente e nós procedemos agora a este estudo. Estaremos então encontrando valores para as constantes de acoplamento magnetoelástico, que melhor ajustam os resultados experimentais, e embora elas não devam ser funções da temperatura, nós permitimos esta dependência, já que não sabemos a dependência térmica das constantes elásticas de 3ª ordem e tampouco estamos em busca de precisão quantitativa. Para os ajustes, as quantidades do modelo foram calculadas em 14 valores de campo magnético, entre 0 e 65 kOe, a cada 5 kOe. Para conhecer o valor das constantes elásticas nos valores calculados de magnetização, elas foram interpoladas.

1- C_{1111} fig.(V-3) eqs.(III-79) e (III-86)

$$\begin{aligned} \vec{H} // \vec{a} \text{ ou } \vec{b}: \quad \Delta C_{1111} = & (B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) (\partial^2 F / \partial A^2) + (B^Y,2)^2 (\partial^2 F / \partial B^2) \\ & + [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^Y,2]^2 (\partial^2 F / \partial P^2) \\ & - 2B^Y,2 (B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) (\partial^2 F / \partial A \partial B) \\ & + 2(B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^Y,2] (\partial^2 F / \partial A \partial P) \\ & - 2B^Y,2 [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2}) + G^Y,2] (\partial^2 F / \partial B \partial P) \\ & + 2(B_{\alpha,2}^{\alpha,1} - B_{\alpha,2}^{\alpha,2} + B_{\alpha,2}^{\alpha,2} + B_{\alpha,2}^Y,2) (\partial F / \partial A) \\ & + 2(B_{Y,2}^Y,2 + B_{Y,2}^Y,2 - B_{Y,2}^Y,2) (\partial F / \partial B) \\ & + C_{111111} e_{11} + C_{111122} e_{22} + C_{111133} e_{33} \end{aligned} \quad (III-79)$$

*As constantes elásticas de 3ª ordem são calculadas para o térbio, usando interpolação das derivadas das constantes elásticas de 2ª ordem relativas a pressão, de Gd e Dy, medidas por Fisher et al.⁷⁰



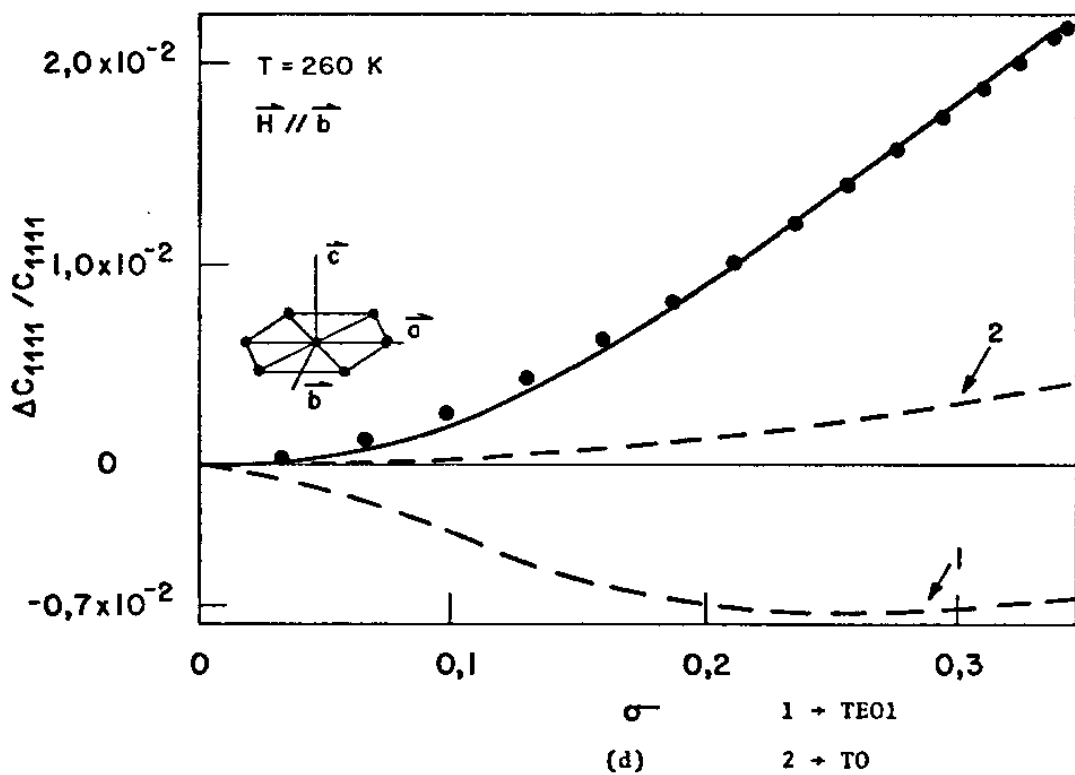
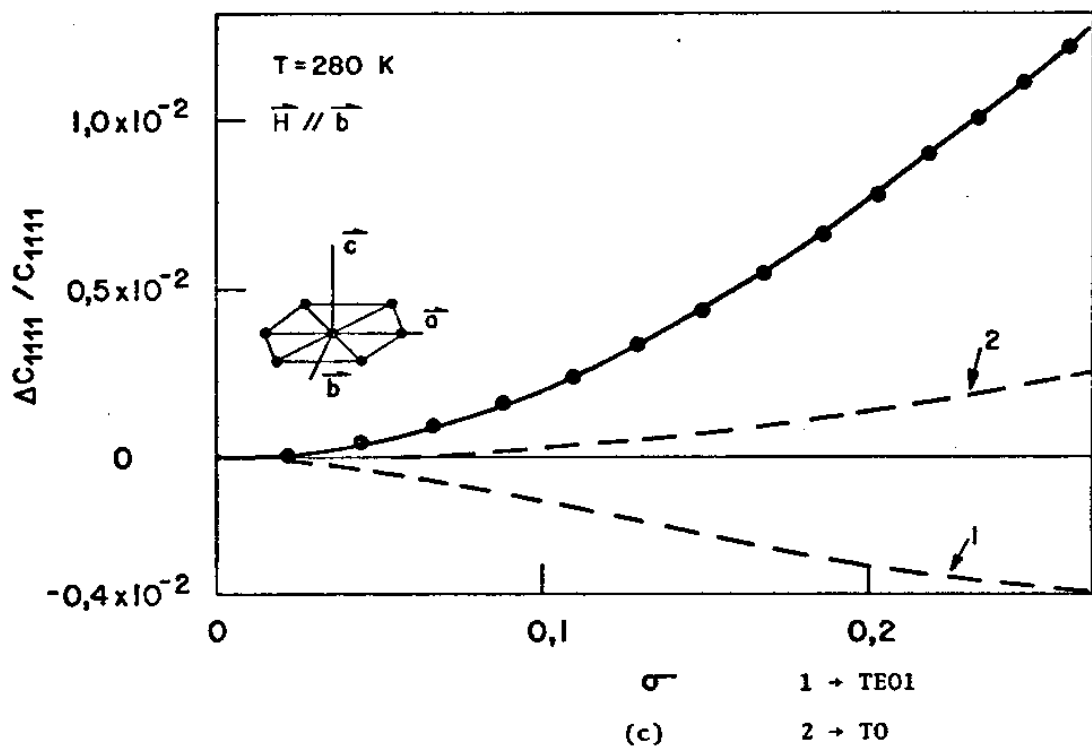


Fig.(V-3) - Ajuste de $\Delta C_{1111}(\vec{\sigma})/C_{1111}$ Para \vec{H}/\vec{c} e \vec{H}/\vec{b} .

linhas sólidas + ajustes

1 → TEO1 (contribuição magnetoelástica de 1ª ordem)

2 → TO (contribuição da energia elástica de 3ª ordem)

(a) \vec{H}/\vec{c} , 280 K, $2(B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_1} - B_{\alpha,2}^{\alpha_1,\alpha_2} + B_{\alpha,2}^{\alpha_2,\alpha_2} + B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma}) = 46,2 \text{ K/íon}$

(b) \vec{H}/\vec{c} , 260 K, " = 40,9 K/íon

(c) \vec{H}/\vec{b} , 280 K, $2(B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_1} - B_{\gamma,2}^{\gamma,\alpha_2}) = 253,0 \text{ K/íon}$

(d) \vec{H}/\vec{b} , 260 K, " = 259,0 K/íon

$$\begin{aligned} \vec{H}/\vec{c}: \quad \Delta C_{1111} = & (B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2})^2 (\partial^2 F / \partial A^2) \\ & + [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})]^2 (\partial^2 F / \partial Q^2) \\ & + 2(B_2^{\alpha,2} - B_1^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) - (G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})] (\partial^2 F / \partial A \partial Q) \\ & + 2(B_{\alpha,2}^{\alpha,1} - B_{\alpha,2}^{\alpha,2} + B_{\alpha,2}^{\alpha,2} + B_{\alpha,2}^{\alpha,2}) (\partial F / \partial A) \\ & + C_{111111} e_{11} + C_{111112} e_{22} + C_{111133} e_{33} \quad (\text{III-86}) \end{aligned}$$

a- \vec{H}/\vec{c} figs. (V-3a) (280 K) e (V-3b) (260 K)

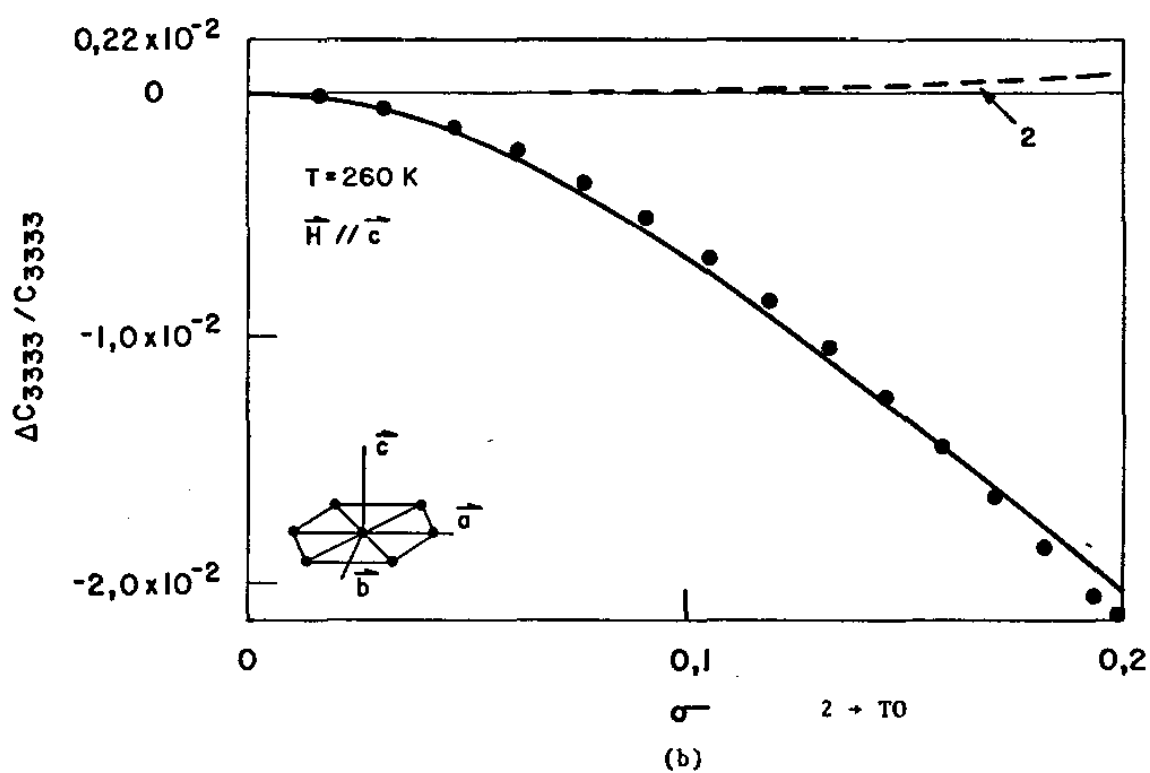
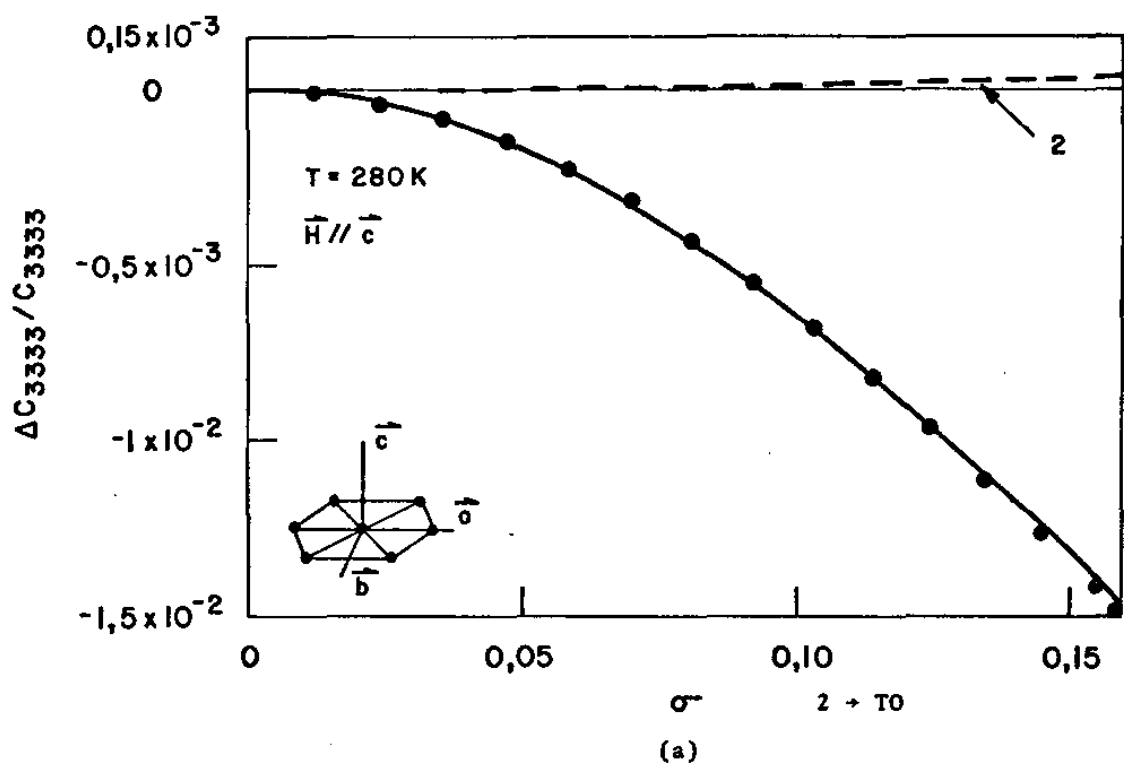
Considerando corretas as constantes elásticas de 1ª ordem obtidas do ajuste da magnetoestrição (eqs. (V-41)), os coeficientes das derivadas segundas de F ficam muito pequenos e a contribuição magnetoelástica de 1ª ordem para $\Delta C_{1111}(\vec{\sigma})/C_{1111}$ fica desprezível. A contribuição da energia elástica de 3ª ordem é pequena e no sentido de diminuir a dependência de C_{1111} com $\vec{\sigma}$. A combinação de constantes magnetoelásticas de 2ª ordem que formam o coeficiente de $\partial F / \partial A$, que dá o ajuste de mínimos quadrados vale 46,2 K/íon para 280 K e 40,9 K/íon para 260 K, o que faz supor que as constantes magnetoelásticas de 2ª ordem sejam da mesma ordem de grandeza que as de 1ª ordem.

b- \vec{H}/\vec{b} figs. (V-3c) (280 K) e (V-3d) (260 K)

Neste caso, a contribuição magnetoelástica de 1ª ordem não é desprezível. Uma vez que o coeficiente de $\partial F / \partial A$ já foi unívocamente determinado para o caso \vec{H}/\vec{c} , o único parâmetro que dispomos para o ajuste é o coeficiente de $\partial F / \partial B$, que vale então 253 K/íon para 280 K e 259 K/íon para 260 K. Embora o ajuste neste caso tenha sido muito bom, estes valores não reproduzem os resultados para \vec{H}/\vec{a} com a mesma precisão (valores um pouco distintos o fazem).

2- C_{3333} fig. (V-4) eqs. (III-80) e (III-87)

$$\begin{aligned} \vec{H}/\vec{a} \text{ ou } \vec{b}: \quad \Delta C_{3333} = & (B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2})^2 (\partial^2 F / \partial A^2) + [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})]^2 (\partial^2 F / \partial P^2) \\ & - 2(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})] (\partial^2 F / \partial A \partial P) + (2B_{\alpha,2}^{\alpha,1} + 4B_{\alpha,2}^{\alpha,2} + 8B_{\alpha,2}^{\alpha,2}) (\partial F / \partial A) \\ & + C_{113333} (e_{11} + e_{22}) + C_{333333} e_{33} \quad (\text{III-80}) \end{aligned}$$



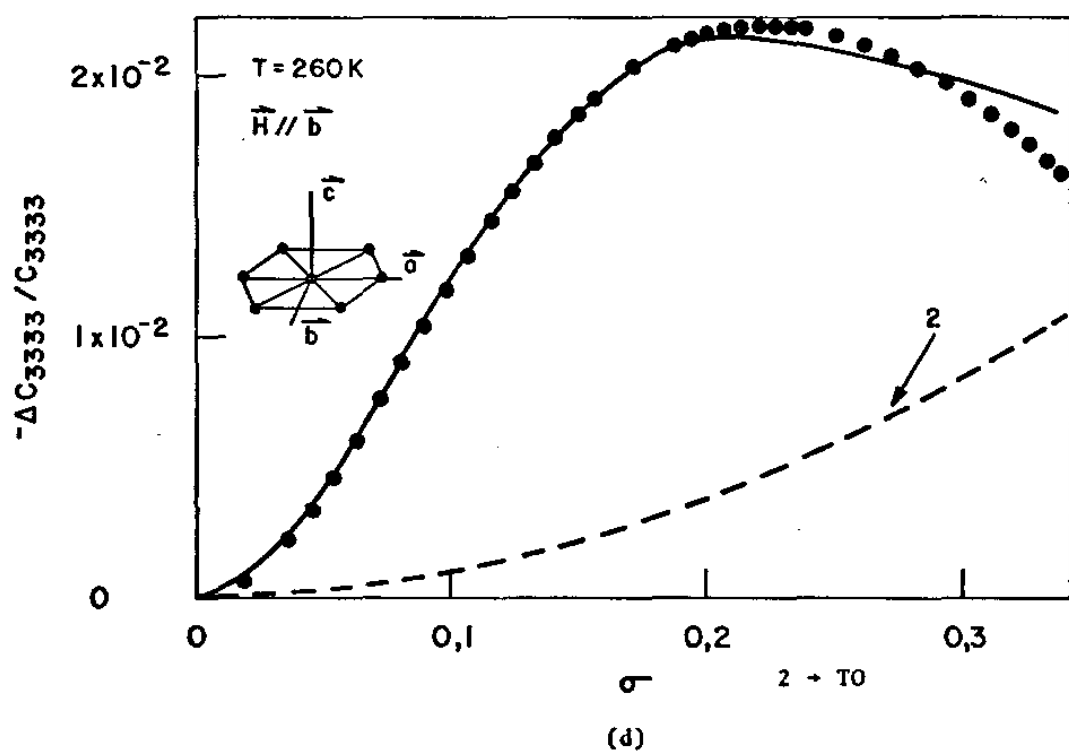
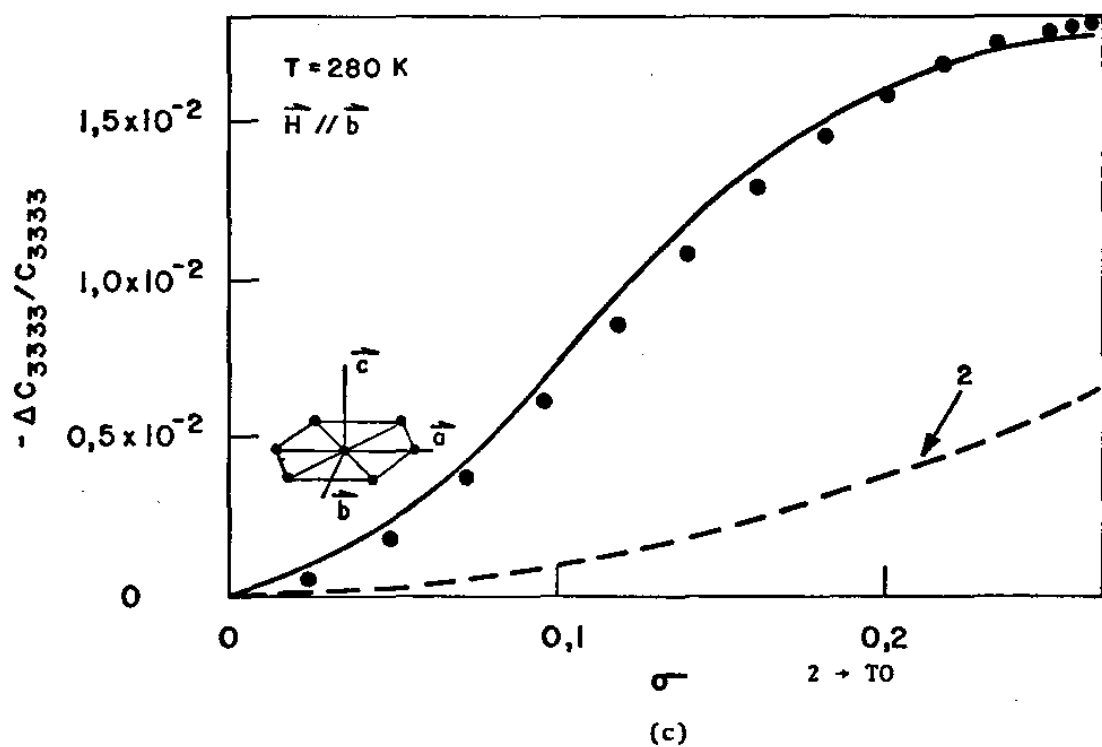


Fig.(V-4) - Ajuste de $\Delta C_{3333}(\vec{\sigma})/C_{3333}$ Para \vec{H}/\vec{c} e \vec{H}/\vec{b} .

linhas sólidas \rightarrow ajustes

2 \rightarrow TO (contribuição da energia elástica de 3ª ordem)

(a) \vec{H}/\vec{c} , 280 K, $(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) = -32,4$ K/ion

$$[G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2} + 2(G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})] = 2,0 \text{ K/ion}$$

(b) \vec{H}/\vec{c} , 260 K, $(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) = -27,0$ K/ion

$$[G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2} + 2(G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})] = 2,0 \text{ K/ion}$$

(c) \vec{H}/\vec{b} , 280 K, $(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) = -54,0$ K/ion

$$[G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2} + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})] = -9,5 \text{ K/ion}$$

(d) \vec{H}/\vec{b} , 260 K, $(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) = -38,0$ K/ion

$$[G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2} + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})] = -7,0 \text{ K/ion}$$

$$\begin{aligned}
\vec{H}/\vec{C}: \quad \Delta C_{3333} = & (B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2})^2 (\partial^2 F / \partial A^2) \\
& + [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})]^2 (\partial^2 F / \partial Q^2) \\
& - 2(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2}) [(G_1^{\alpha,0} + 2G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} + 2G_2^{\alpha,2})] (\partial^2 F / \partial A \partial Q) \\
& + (2B_{\alpha,2}^{\alpha,1} + 4B_{\alpha,2}^{\alpha,2} + 8B_{\alpha,2}^{\alpha,3}) (\partial F / \partial A) \\
& + C_{113333}(e_{11}^4 e_{22}) + C_{333333} e_{33} \quad (III-87)
\end{aligned}$$

Considerando corretas as constantes magnetoelásticas de 1ª ordem determinadas através da magnetoestrição, a contribuição do acoplamento magnetoelástico de 1ª ordem para $\Delta C_{3333}(\vec{\sigma})/C_{3333}$ é muito maior do que a observada e nós vamos supor que a contribuição real é diferente desta. Vamos supor que a contribuição da energia elástica de 3ª ordem está corretamente calculada e ajustar as curvas experimentais pela escolha de constantes magnetoelásticas de 1ª ordem. É claro que a energia magnetoelástica de 2ª ordem deve também contribuir para o comportamento observado. Mas a tentativa de escolha simultânea de constantes magnetoelásticas de 1ª e 2ª ordem para ajustar os resultados experimentais, através de 5 funções semelhantes da magnetização, pode convergir para uma situação fisicamente irreal, embora os ajustes sejam de melhor qualidade (menor χ^2). Deste modo - considerando apenas 1ª ordem - as constantes magnetoelásticas de 1ª ordem encontradas vão "englobar" as de 2ª ordem. Os ajustes são bons, embora $(B_1^{\alpha,2} + 2B_2^{\alpha,2})$ possa diferir de até 2 vezes do seu valor encontrado no ajuste da magnetoestrição e $[(G_1^{\alpha,0} - G_1^{\alpha,2}) + 2(G_2^{\alpha,0} - G_2^{\alpha,2})]$ chegue a mudar de sinal. Os valores obtidos são mostrados na fig.(V-4).

3- C_{2121} fig.(V-5) eq.(III-85)

$$\begin{aligned}
\vec{H}/\vec{a} \text{ ou } \vec{b}: \quad \Delta C_{2121} = & (B_Y^{\alpha,2})^2 (\partial^2 F / \partial C^2) + (2B_{\alpha,2}^Y + B_{\alpha,2}^{\omega,2}) (\partial F / \partial A) + (2B_{Y,2}^Y + B_{Y,2}^{\omega,2}) (\partial F / \partial B) \\
& + [(3/4)C_{222222} - (1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122}] e_{11} \\
& + [(1/2)C_{111111} - (1/4)C_{111122} - (1/4)C_{222222}] e_{22} + (1/2)(C_{111133} - C_{112233}) e_{33} \quad (III-85)
\end{aligned}$$

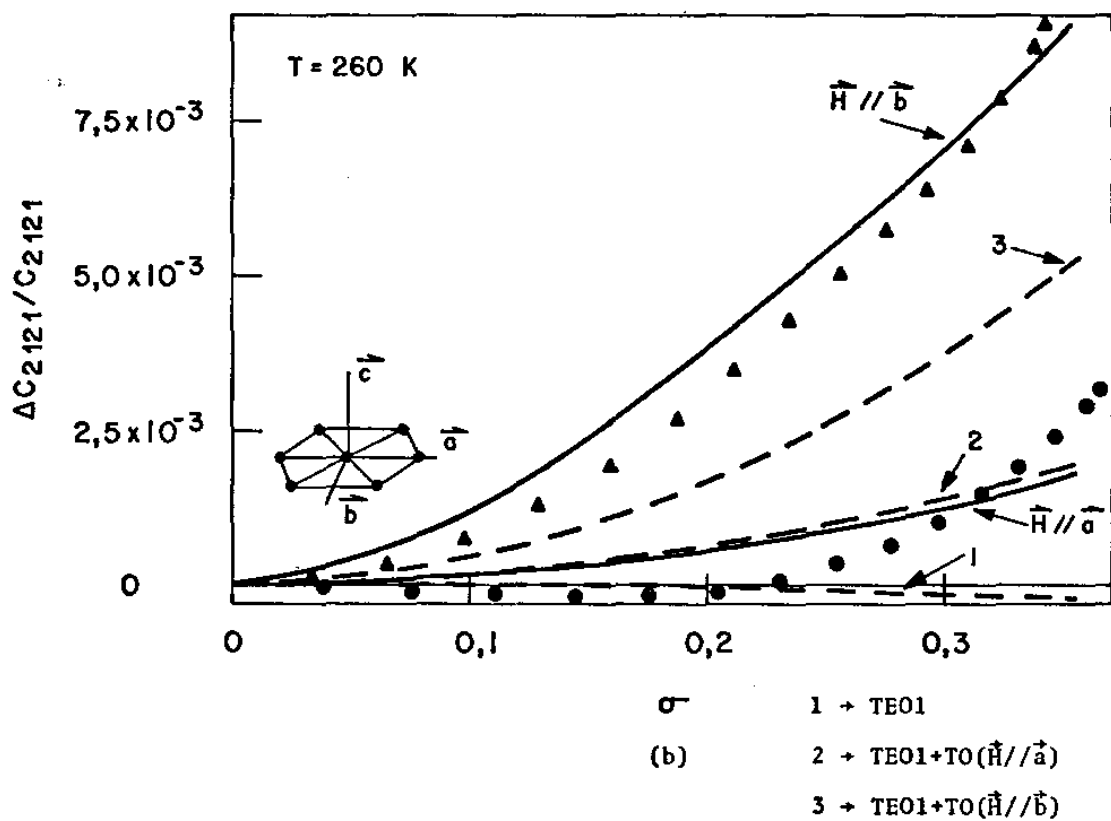
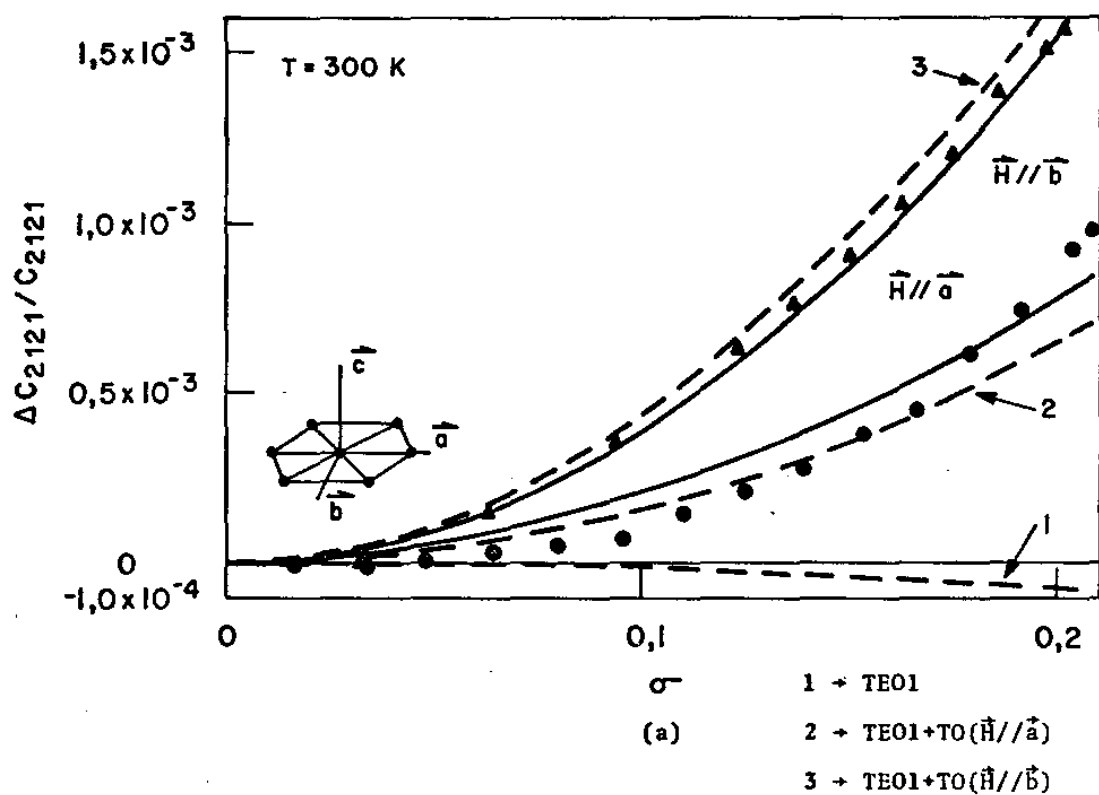


Fig.(V-5) - Ajuste de $\Delta C_{2121}(\vec{\sigma})/C_{2121}$ Para \vec{H}/\vec{a} e \vec{H}/\vec{b} .

linhas sólidas → ajustes

1 → TEO1 (contribuição magnetoelástica de 1ª ordem)

2 → TEO1 + TO(\vec{H}/\vec{a}) (contribuição elástica de 3ª ordem)

3 → TEO1 + TO(\vec{H}/\vec{b}) (contribuição elástica de 3ª ordem)

(a) 300 K, $(2B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\alpha,2}^{\omega,\omega}/2) = 0,11 \text{ K/íon}$

$$(2B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}) = -1,27 \text{ K/íon}$$

(b) 260 K, $(2B_{\alpha,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\alpha,2}^{\omega,\omega}/2) = -6,57 \text{ K/íon}$

$$(2B_{\gamma,2}^{\gamma,\gamma} + B_{\gamma,2}^{\gamma,\omega}) = 5,65 \text{ K/íon}$$

Aqui nós vemos que a contribuição da energia elástica de 3ª ordem para o comportamento observado é bastante grande. A 300 K, por exemplo, a soma da contribuição elástica de 3ª ordem com a magnetoelástica de 1ª ordem, considerando correto o valor de B_Y^2 , obtido do ajuste da magnetoestrição, descreve bastante bem o comportamento experimental. Para verificar a contribuição magnetoelástica de 2ª ordem, nós ajustamos as diferenças entre as curvas experimentais e as curvas "TEO1+TO" pela escolha das combinações de constantes magnetoelásticas de 2ª ordem, coeficientes de $\partial F/\partial A$ e $\partial F/\partial B$. Estes valores são mostrados na fig.(V-5), que mostra claramente a importância das interações de ordem superior no comportamento observado de $\Delta C_{2121}(\vec{\sigma})/C_{2121}$. A interação magnetoelástica, considerada até 1ª ordem nas deformações, não pode responder, por exemplo, pela dependência com a direção do campo.

4- C_{3131} fig.(V-6) eq.(III-83)

$\vec{H} // \vec{a}$ ou \vec{b} :
$$\Delta C_{3131} = (-B^E \cdot 2 \cdot \sqrt{3}/2P_2^0)^2 (\partial^2 F / \partial D^2) + (2B_{\alpha,2}^{E_1, E_1} - B_{\alpha,2}^{E_1, E_2} + B_{\alpha,2}^{E_2, E_2} / 2) (\partial F / \partial A) + (2B_{Y,2}^{E_1, E_1} - B_{Y,2}^{E_1, E_2} + B_{Y,2}^{E_2, E_2} / 2) (\partial F / \partial B) + C_{115555} e_{11} + C_{114444} e_{22} + C_{334444} e_{33} \quad (III-83)$$

A dependência de C_{3131} com a magnetização, para campo aplicado no eixo c, é muito pequena e está no limite da resolução experimental, e os procedimentos de ajuste perdem a validade. A dependência para campo aplicado no plano basal é grande e como em C_{2121} , a interação magnetoelástica de 1ª ordem é insuficiente para descrever o comportamento observado, já que $C_{3131}(\vec{\sigma})$ é sensível a direção do campo basal. Para ajustar o comportamento experimental, nós supusemos que as contribuições magnetoelástica de 1ª

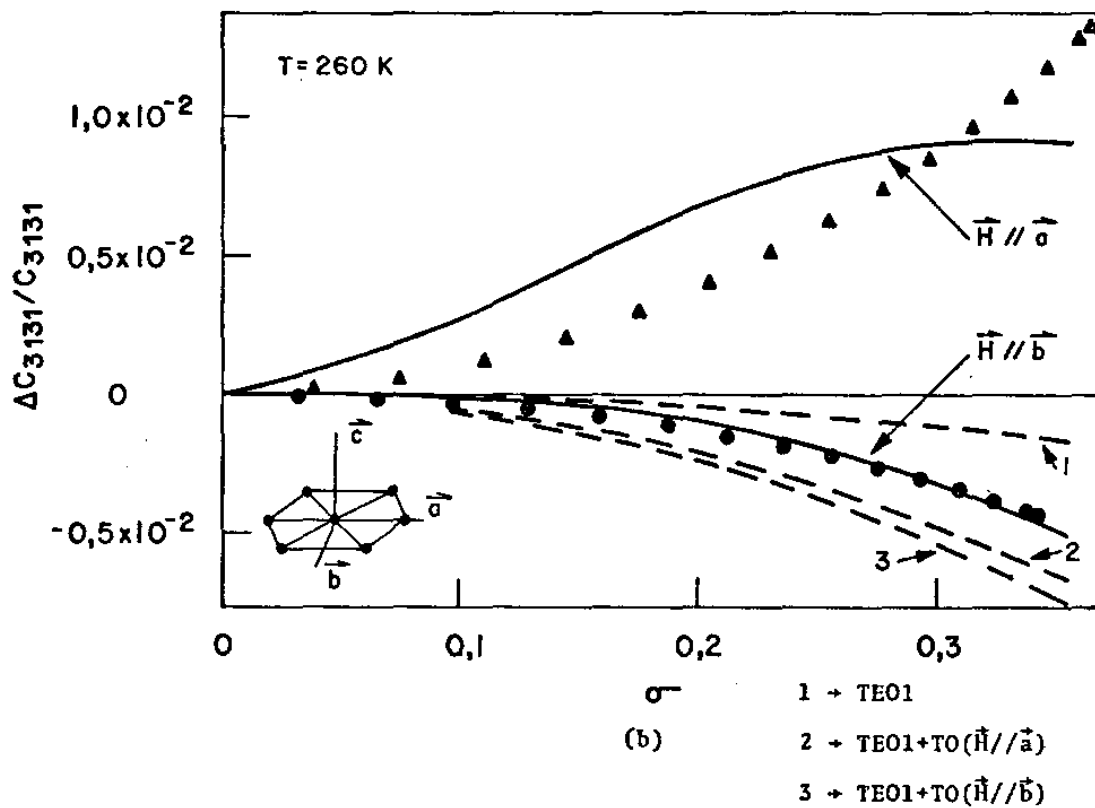
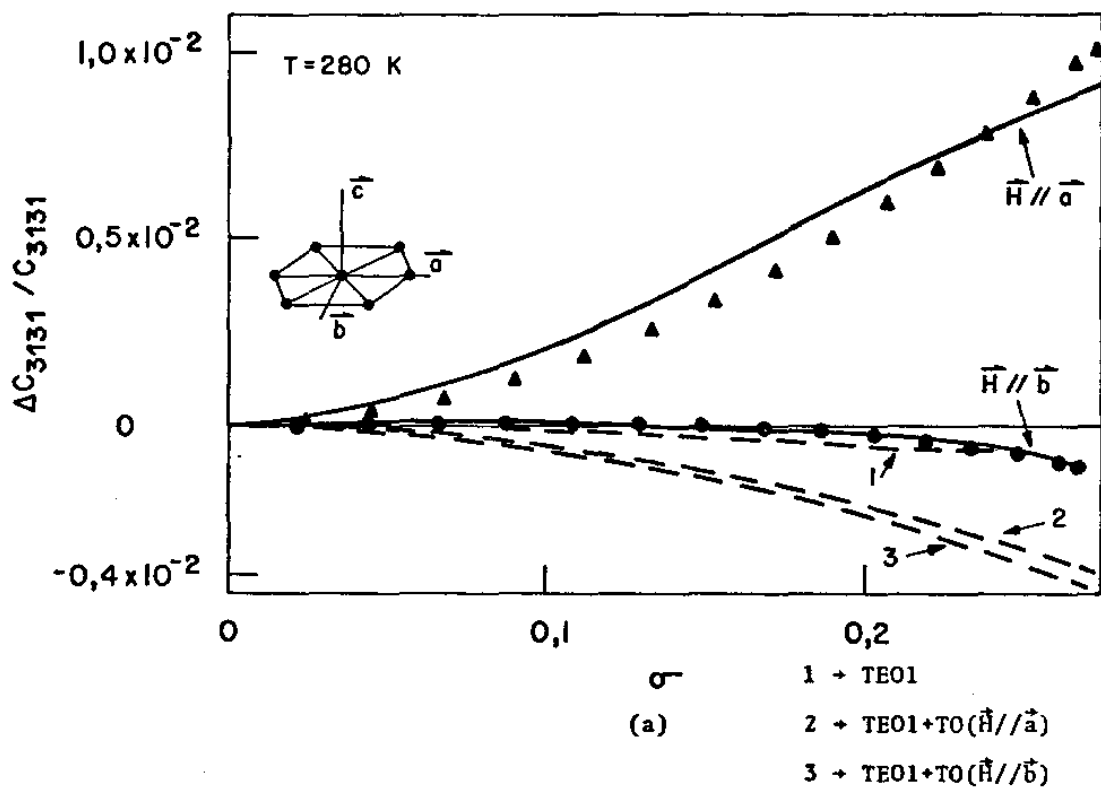


Fig.(V-6) - Ajuste de $\Delta C_{3131}(\vec{\sigma})/C_{3131}$ Para \vec{H}/\vec{a} e \vec{H}/\vec{b} .

linhas sólidas \rightarrow ajustes

1 \rightarrow TEO1 (contribuição magnetoelástica de 1ª ordem)

2 \rightarrow TEO1 + TO(\vec{H}/\vec{a}) (contribuição elástica de 3ª ordem)

3 \rightarrow TEO1 + TO(\vec{H}/\vec{b}) (contribuição elástica de 3ª ordem)

(a) 280 K, $(2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} - B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2}/2) = -45,7 \text{ K/íon}$

$$(2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} - B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2}/2) = -24,3 \text{ K/íon}$$

(b) 260 K, $(2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} - B_{\alpha,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2}/2) = -31,2 \text{ K/íon}$

$$(2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_1} - B_{\gamma,2}^{\epsilon_1,\epsilon_2} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_2,\epsilon_2}/2) = -20,3 \text{ K/íon}$$

ordem (com os parâmetros de H_0) e elástica de 3ª ordem estão corretas e como em C_{2121} , ajustamos a diferença entre o comportamento experimental e as curvas "TE01+T0" com a interação magnetoelástica de 2ª ordem. Os valores obtidos e os ajustes são mostrados na fig.(V-6).

5- C_{1313} fig.(V-7) eq.(III-82)

$$\begin{aligned} \vec{H} // \vec{a} \text{ ou } \vec{c}^*: \quad \Delta C_{1313} = & (-B^{\epsilon,2} + \sqrt{3/2} P_2^0)^2 (\partial^2 F / \partial D^2) \\ & + (2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_1} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2, \epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial A) \\ & + (2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_1} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_2, \epsilon_2} / 2) (\partial F / \partial B) \\ & + C_{115555} \epsilon_{11} + C_{114444} \epsilon_{22} + C_{334444} \epsilon_{33} \end{aligned} \quad (III-82)$$

Como em C_{2121} e C_{3131} , nós assumimos que os parâmetro de H_0 estão corretos, e ajustamos as diferenças entre os resultados experimentais e as curvas "TE01+T0" com a interação magnetoelástica de 2ª ordem. Uma vez que para $\vec{H} // \vec{c}$ $(\partial F / \partial B) = 0$, o ajuste de $\Delta C_{1313}(\vec{\sigma} // \vec{c}) / C_{1313}$ permite a determinação unívoca do coeficiente de $\partial F / \partial A$, que resultou em -9,53 K/íon. Considerando correto este coeficiente, ajustamos $\Delta C_{1313}(\vec{\sigma} // \vec{a}) / C_{1313}$ encontrando para o coeficiente de $\partial F / \partial B$ o valor de -15,1 K/íon.

6- $C_{1313} - C_{3131}$ fig.(V-8) eq.(III-91)*

$$\begin{aligned} C_{1313} - C_{3131} = & -2/6 B^{\epsilon,2} P_2^0 (\partial^2 F / \partial D^2) + 2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} (\partial F / \partial A) \\ & + 2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} (\partial F / \partial B) \end{aligned} \quad (III-91)$$

A eq.(III-91) inclui um termo rotacional e dois de interação magnetoelástica de 2ª ordem. Considerando corretos os valores de $B^{\epsilon,2}$ e P_2^0 de H_0 , a contribuição do termo rotacional para a diferença observada é muito pequena. Nós ajustamos a diferença entre o comportamento experimental e o termo rotacional com a interação magnetoelástica de 2ª ordem. $B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2}$ pode ser unívocamente determinado do ajuste para $\vec{H} // \vec{c}$ e $B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2}$ foi encontrado do ajuste

*Para $\vec{H} // \vec{c}$, $(\partial F / \partial B) = 0$.

e para \vec{H}/\vec{a} .

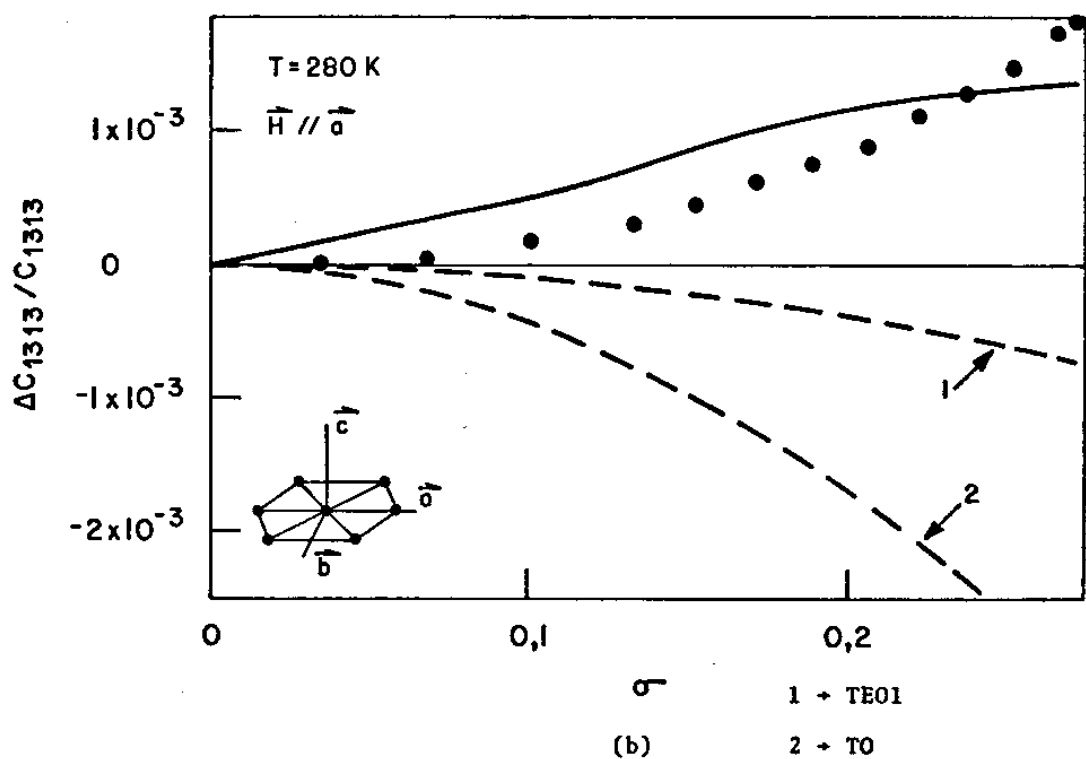
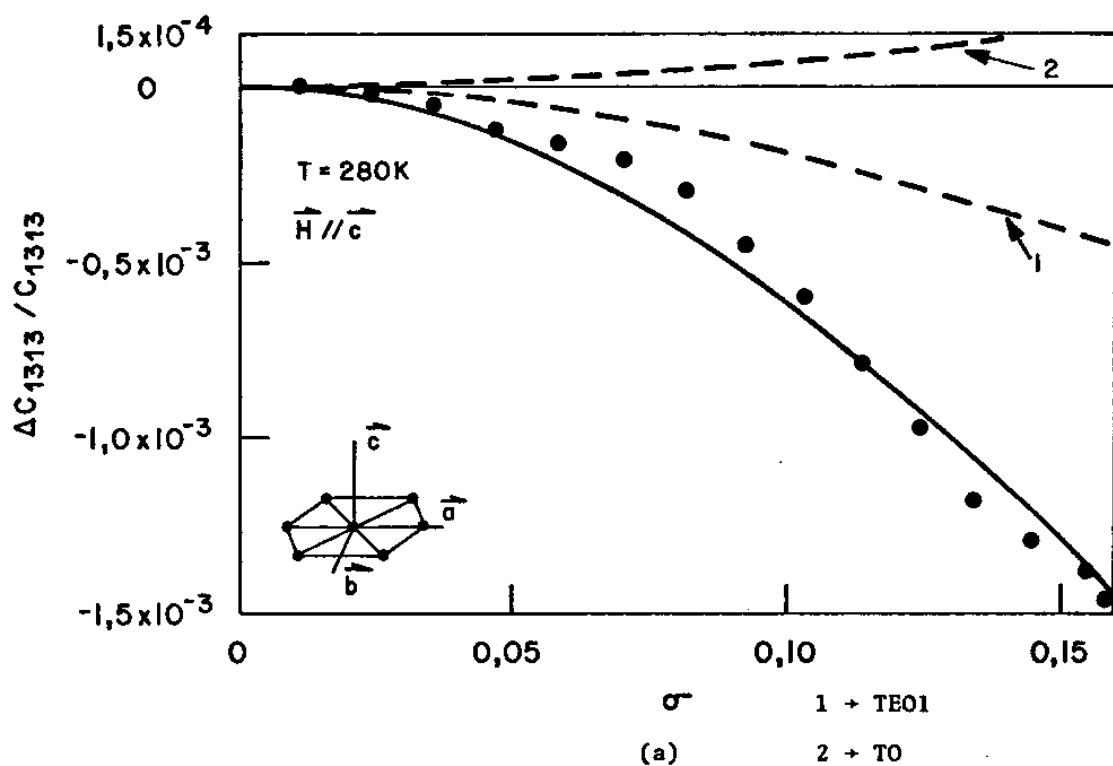


Fig.(V-7) - Ajuste de $\Delta C_{1313}(\vec{\sigma})/C_{1313}$ Para $\vec{H} // \vec{c}$ e $\vec{H} // \vec{a}$.

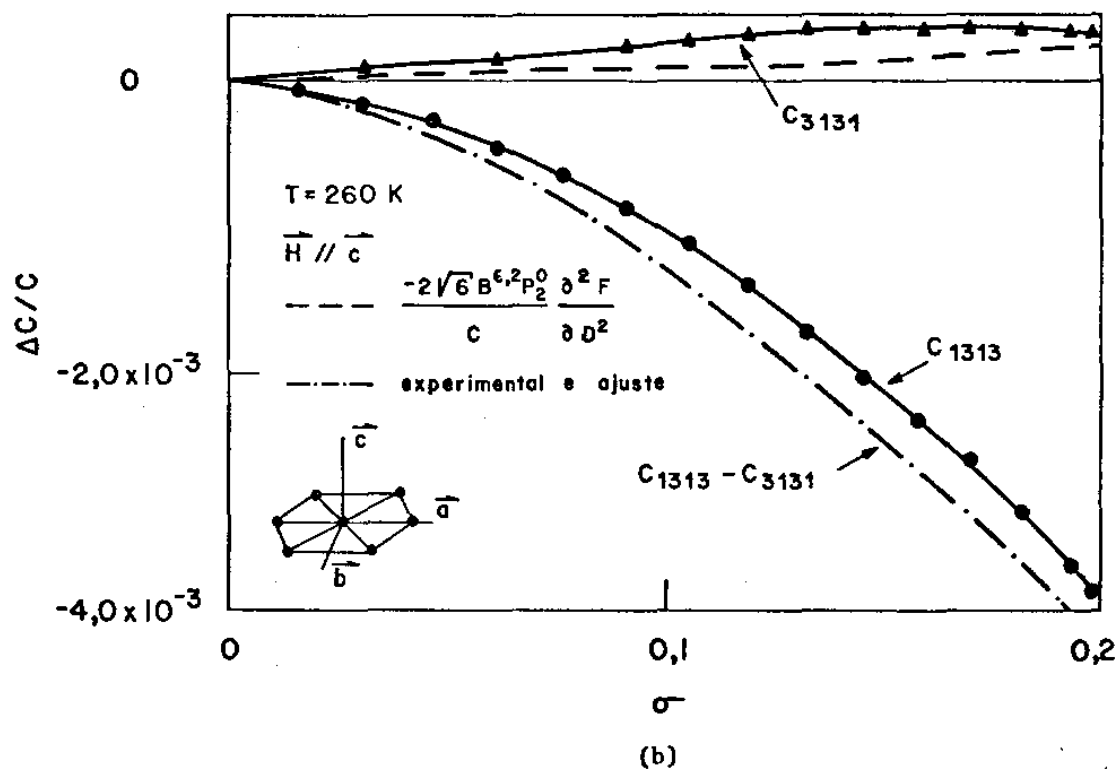
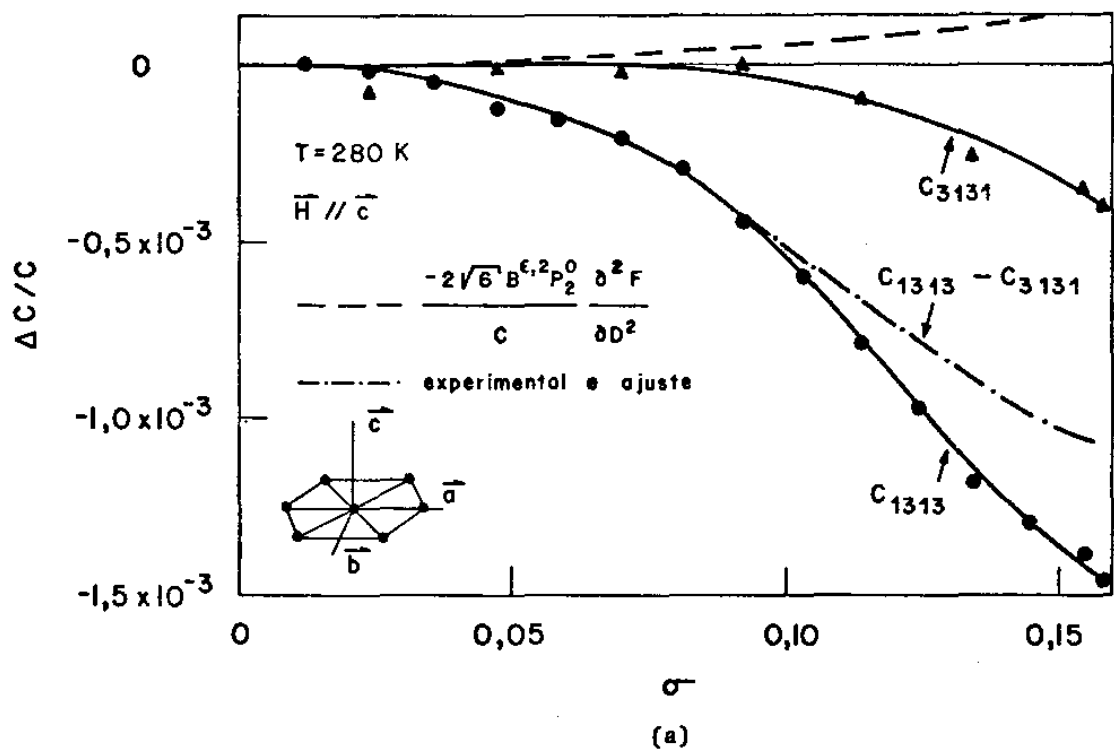
linhas sólidas → ajustes

1 → TE01 (contribuição magnetoelástica de 1ª ordem)

2 → TO (contribuição elástica de 3ª ordem)

$$(a) \text{ 280 K, } \vec{H} // \vec{c}, (2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_1} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} + B_{\alpha,2}^{\epsilon_2, \epsilon_2}/2) = -9,5 \text{ K/íon}$$

$$(b) \text{ 280 K, } \vec{H} // \vec{a}, (2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_1} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} + B_{\gamma,2}^{\epsilon_2, \epsilon_2}/2) = -15,1 \text{ K/íon}$$



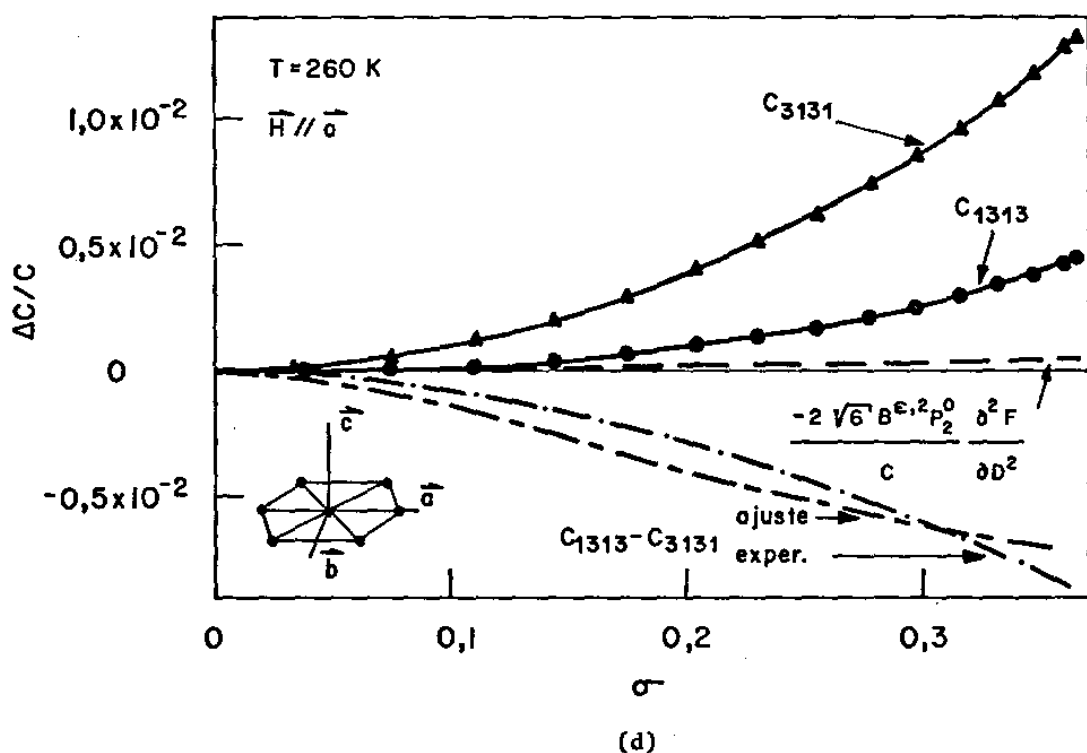
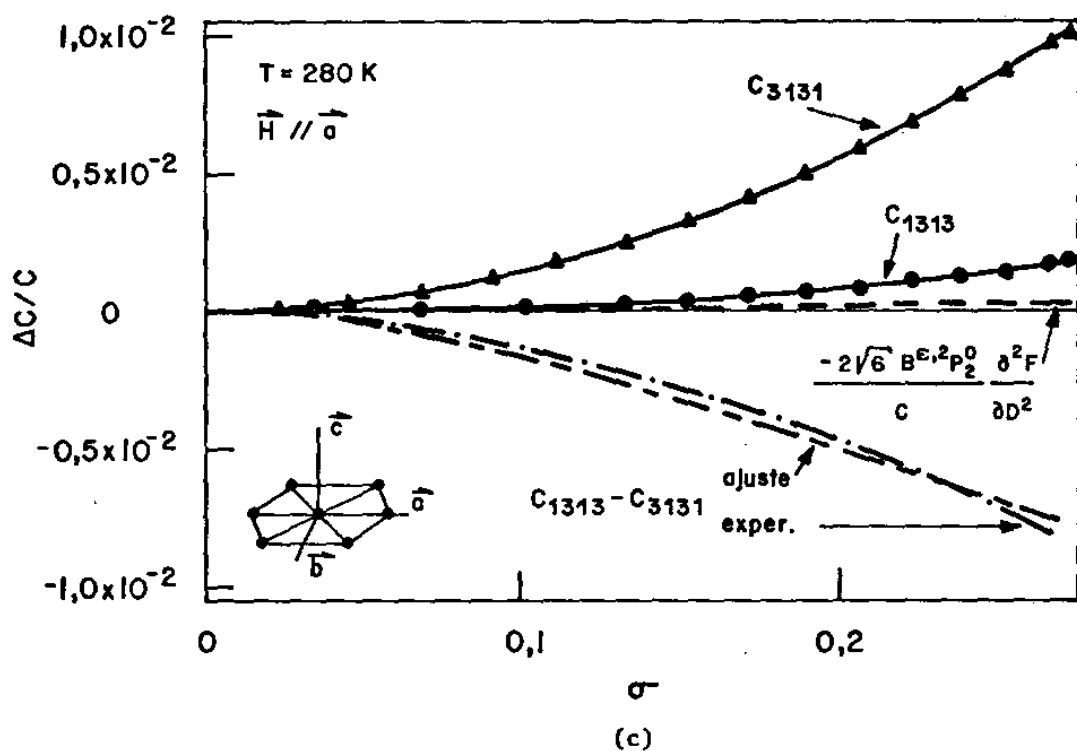


Fig.(V-8) - Ajuste de $C_{1313}(\vec{\sigma}) - C_{3131}(\vec{\sigma})$ Para \vec{H}/\vec{c} e \vec{H}/\vec{a} .

(a) 280 K, \vec{H}/\vec{c} , $2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} = -10,9$ K/íon

(b) 260 K, \vec{H}/\vec{c} , $2B_{\alpha,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} = -21,5$ K/íon

(c) 280 K, \vec{H}/\vec{a} , $2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} = -45,9$ K/íon

(d) 260 K, \vec{H}/\vec{a} , $2B_{\gamma,2}^{\epsilon_1, \epsilon_2} = -38,1$ K/íon

A análise dos resultados experimentais sobre o comportamento das constantes elásticas de 2ª ordem do térbio monocristalino, com o estado de magnetização do material, mostrou a necessidade de que as interações magnetoelásticas fossem consideradas até 2ª ordem nas deformações. Também a energia elástica de 3ª ordem leva a contribuições mensuráveis no comportamento das várias constantes elásticas medidas e deve ser incluída na teoria. Ambas as contribuições de ordem superior nas deformações, interação magnetoelástica de 2ª ordem e energia elástica de 3ª ordem, tem origem nos valores excepcionalmente grandes que as deformações estáticas podem atingir nas terras raras, como função da temperatura e da magnetização.

A magnetoestrição estática é um efeito de 1ª ordem nas deformações e a contribuição da interação magnetoelástica de 2ª ordem pode ser desprezada na sua análise²⁵. Entretanto nós vimos que esta interação produz efeitos mensuráveis no comportamento das constantes elásticas de 2ª ordem com a magnetização, embora as constantes magnetoelásticas de 2ª ordem sejam, resguardadas as limitações quantitativas do modelo numérico, da mesma ordem de grandeza que as de 1ª ordem - elas aparecem em H_0 multiplicando produtos de deformações, que são geralmente bastante menores que as próprias deformações. A contribuição das interações de ordem superior está presente em todas as constantes elásticas, mas só pode ser observada de uma forma inequívoca, na dependência de $C_{2121}(\vec{\sigma})$ e $C_{3131}(\vec{\sigma})$ com a direção de aplicação do campo no plano basal

Nós vimos que na expansão completa do campo cristalino e da interação magnetoelástica de 2 íons até 2ª ordem nas deformações, aparece um número muito grande de constantes magnetoelasti-

cas e a determinação experimental de todas elas é praticamente impossível. Entretanto, o cálculo das propriedades termodinâmicas com o modelo simplificado, onde negligenciamos as interações de ordem superior e limitamos as interações magnetoelásticas aos termos de 2ª ordem nos operadores de momento angular, foi bem sucedido na descrição qualitativa dos fenômenos observados, o que é um estímulo para que outros aspectos do modelo sejam explorados, assim como a sua aplicação a outros materiais.

É difícil analisar os resultados deste trabalho em termos da teoria de Southern e Goodings³⁹ ou dos outros trabalhos usando "Invariança Rotacional"^{52,53,71,72}. Primeiro porque eles fazem a suposição incorreta de que as derivadas segundas da energia elástica escrita em termos do tensor das deformações finitas, até 1ª ordem, relativas as deformações infinitesimais, são constantes elásticas de 2ª ordem. Além disso, as previsões de Southern e Goodings não são em geral verificadas pelo conjunto de dados. Ainda persiste a questão sobre a escolha do tensor de deformações mais apropriado para descrever o sistema elástico, o das deformações finitas ou o das infinitesimais. Nós adotamos o último por ser a opção mais usual e bastante discutida na literatura. É importante ressaltar ainda que, irrelevante a esta escolha, o potencial cristalino da eq.(III-13) é um escalar e portanto invariante frente a rotações, e que os termos envolvendo deformações antissimétricas (rotacionais) aparecem naturalmente. Estes termos contribuem, por exemplo, para que os comportamentos de $C_{1313}(\vec{\sigma})$ e $C_{3131}(\vec{\sigma})$ sejam distintos, quando o campo é aplicado na mesma direção (fig.(V-7)), embora sua contribuição não possa ser inequívocamente determinada a partir dessa diferença, pois a interação magnetoelástica de 2ª ordem também contribui para ela.

MEDIDAS DE CONSTANTES ELÁSTICAS COM ULTRASOM EM REDES HCP

Há cinco constantes elásticas de 2ª ordem independentes em cristais de estrutura hcp⁷³: C_{11} , C_{33} , C_{12} , C_{13} e C_{44} *. Estas constantes elásticas podem ser medidas de vários modos, medindo a velocidade de propagação do som de diferentes maneiras. Em cristais ideais, diferentes modos de medir uma determinada constante elástica dão o mesmo resultado. Entretanto, nas terras raras pesadas, as deformações podem acoplar com o sistema magnético e esta equivalência deixa de ocorrer, ou equivalentemente, aumenta o número de constantes elásticas independentes.

A tabela (A-1) mostra algumas formas de medir as cinco constantes elásticas independentes, com as direções de propagação, de polarização, e as expressões relacionando as constantes elásticas com as velocidades de propagação.

TABELA (A-1)

velocidade	direção do vetor de onda \vec{k}	polarização	relação*
v_1	$\vec{a} ([11\bar{2}0])$	$\vec{a} ([11\bar{2}0])$	$C_{11} = \rho v_1^2$
v_3	$\vec{c} ([0001])$	$\vec{c} ([0001])$	$C_{33} = \rho v_3^2$
v_4	$\vec{c} ([0001])$	plano basal	$C_{44} = \rho v_4^2$
v_6	$\vec{a} ([11\bar{2}0])$	$\vec{b} ([1\bar{1}00])$	$C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2 =$ $= \rho v_6^2$
v_{QL}	quase longitudinal, a 45° entre os eixos b e c		$(1/4)(C_{11} + C_{33} + 2C_{44})$ $+ (1/2)[(1/4)(C_{11} -$ $C_{33})^2 + (C_{13} + C_{44})^2]^{1/2} =$ $= \rho v_{QL}^2$
v_{QT}	quase transversal, a 45° entre os eixos b e c		$(1/4)(C_{11} + C_{33} + 2C_{44})$ $- (1/2)[(1/4)(C_{11} -$ $C_{33})^2 + (C_{13} + C_{44})^2]^{1/2} =$ $= \rho v_{QT}^2$

*Usando a notação de Voigt.

As formas de ondas empregadas nas medidas deste trabalho aparecem na fig.(A-1). As constantes elásticas medidas valem:

$$C_{1111} = v_1^2 \quad (A-1)$$

$$C_{3333} = v_3^2 \quad (A-2)$$

$$C_{2121} = v_{6,ba}^2 \quad (A-3)$$

$$C_{3131} = v_{5,ca}^2 \quad (A-4)$$

$$C_{1313} = v_{5,ac}^2 \quad (A-5)$$

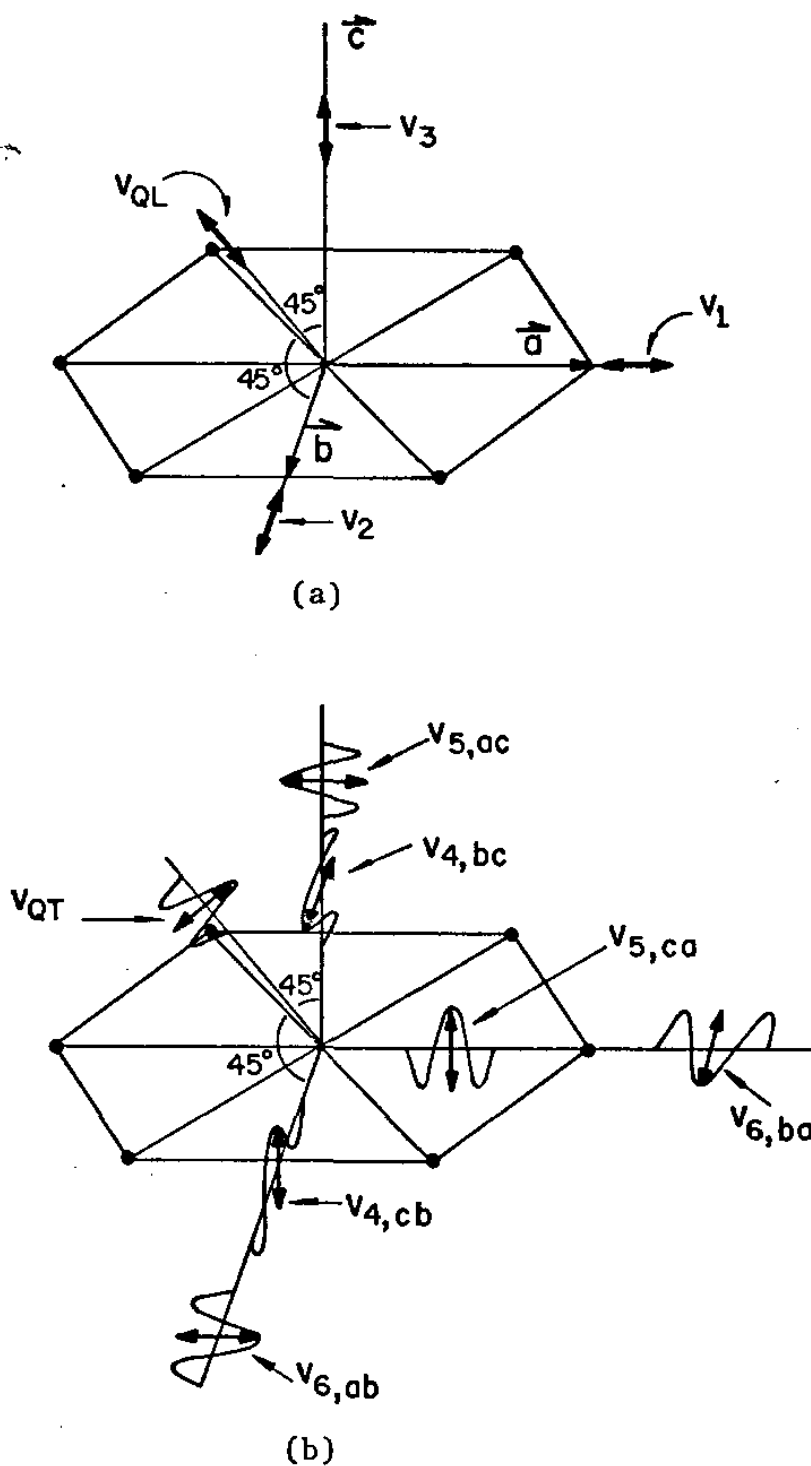


Fig.(A-1) - Formas de Ondas Elásticas Para Medidas de Constantes Elásticas em Redes HCP

APÊNDICE B

OPERADORES TENSORIAIS ESFÉRICOS IRREDUTÍVEIS DE MOMENTO ANGULAR

Um conjunto de operadores T_k^q ($k \geq 0$ é um número inteiro e $q = -k, -k+1, \dots, +k$) forma um conjunto de operadores tensoriais esféricos irredutíveis quando eles satisfazem as seguintes regras de comutação⁷⁴:

$$[J_z, T_k^q] = q T_k^q \quad (B-1)$$

$$[J_{\pm}, T_k^q] = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} T_k^{q \pm 1} \quad (B-2)$$

onde

$$J_{\pm} = J_x \pm i J_y \quad (B-3)$$

e J_x , J_y e J_z são as componentes do momento angular total.

A aplicação destes operadores a problemas físicos é justificada pelo teorema de Wigner-Eckart. Ele mostra que os elementos de matriz de 2 conjuntos de operadores, T_k^q e V_k^q , são proporcionais e que a razão de proporcionalidade é o cociente entre os seus elementos de matriz reduzidos. Uma aplicação útil destes operadores na solução de problemas de magnetismo foi encontrada por Stevens⁶², em que as componentes dos operadores tensoriais são combinações das componentes do momento angular. Os operadores assim definidos são isomorfos aos harmônicos esféricos e seus elementos de matriz são fáceis de calcular na forma matricial. Há várias formas equivalentes de escrever estes operadores e elas diferem apenas por fatores constantes. Neste trabalho nós usamos os definidos por Watanabe⁴⁸. $Q_{\ell}^{\ell}(\vec{J})$ é definido como:

$$Q_{\ell}^{\ell}(J) = (-1)^{\ell} J_{+}^{\ell} \quad (B-4)$$

e os outros 2ℓ operadores da mesma classe podem ser obtidos das relações de recorrência das eqs. (B-1) e (B-2).

Uma vez que estes operadores entram na hamiltoniana, é importante que eles ou suas combinações sejam hermitianas. Os $Q_{\ell}^m(\vec{J})$ só são hermitianos quando $m=0$, mas as combinações

$$Q_{\ell m}^+(\vec{J}) = [(-1)^m Q_{\ell}^m(\vec{J}) + Q_{\ell}^{-m}(\vec{J})]/2 \quad (\text{B-5})$$

$$Q_{\ell m}^-(\vec{J}) = [(-1)^m Q_{\ell}^m(\vec{J}) - Q_{\ell}^{-m}(\vec{J})]/2i \quad (\text{B-6})$$

são sempre hermitianas. Assim, os operadores usados neste trabalho foram:

$$Q_2^0(\vec{J}) = (2/3)^{1/2} [3J_z^2 - J(J+1)]$$

$$Q_4^0(\vec{J}) = (2/35)^{1/2} [35J_z^4 - 30J(J+1)J_z^2 + 25J_z^2 + 3J^2(J+1)^2 - 6J(J+1)]$$

$$Q_6^0(\vec{J}) = (4/231)^{1/2} [231J_z^6 - 315J(J+1)J_z^4 + 735J_z^4 + 105J^2(J+1)^2J_z^2 - 525J(J+1)J_z^2 + 294J_z^2 - 5J^3(J+1)^3 + J^2(J+1)^2 - 60J(J+1)]$$

$$Q_{22}^+(\vec{J}) = J_x^2 - J_y^2 \quad (\text{B-7})$$

$$Q_{21}^+(\vec{J}) = J_x J_z + J_z J_x$$

$$Q_{21}^-(\vec{J}) = J_y J_z + J_z J_y$$

$$Q_{22}^-(\vec{J}) = J_x J_y + J_y J_x$$

$$Q_{66}^+(\vec{J}) = [J_+^6 + J_-^6]/2$$

APÊNDICE C

RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Neste apêndice nós apresentamos as tabelas com os resultados experimentais. Para cada constante elástica, temperatura e direção do campo magnético, a magnetização reduzida (σ), a frequência de sobreposição (em Hz) e a variação relativa da constante elástica ($\Delta C/C$) aparecem como função do campo magnético (em kOe). As medidas de ultrassom foram feitas com transdutores de 20 MHz, com corte-X para constantes elásticas longitudinais e corte-Y para transversais.

C_{1111} (\bar{k}/\bar{a}), \bar{H}/\bar{a} :

TEMPERATURA = 300.0 K				TEMPERATURA = 280.0 K			
H	SIGMA	FREQ	DELTC/C	H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	143770.50	0.000E+00	0.00	0.0000	144291.50	0.000E+00
5.00	0.0165	143776.00	7.651E-05	5.03	0.0230	144304.50	1.802E-04
10.00	0.0323	143785.00	2.017E-04	9.97	0.0450	144329.00	5.198E-04
14.96	0.0484	143799.50	4.034E-04	15.03	0.0680	144366.00	1.033E-03
20.00	0.0644	143822.00	7.164E-04	19.99	0.0905	144422.50	1.816E-03
25.02	0.0800	143854.00	1.162E-03	24.98	0.1121	144485.00	2.682E-03
30.00	0.0954	143898.50	1.642E-03	30.03	0.1328	144571.50	3.881E-03
35.00	0.1106	143927.75	2.188E-03	35.00	0.1523	144652.00	4.997E-03
40.00	0.1252	143976.00	2.859E-03	40.02	0.1715	144746.50	6.307E-03
45.00	0.1394	144025.50	3.547E-03	45.01	0.1892	144848.00	7.714E-03
49.98	0.1533	144088.00	4.417E-03	50.00	0.2066	144956.50	9.217E-03
54.98	0.1667	144141.50	5.161E-03	54.98	0.2225	145051.00	1.053E-02
60.00	0.1794	144208.00	6.086E-03	60.01	0.2379	145159.00	1.202E-02
64.96	0.1918	144269.00	6.935E-03	64.99	0.2523	145248.00	1.326E-02
70.00	0.2037	144346.00	8.006E-03	70.01	0.2660	145358.50	1.479E-02
72.08	0.2089	144368.00	8.312E-03	72.04	0.2720	145385.00	1.516E-02

TEMPERATURA = 290.0 K				TEMPERATURA = 270.0 K			
H	SIGMA	FREQ	DELTC/C	H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	143996.00	0.000E+00	0.00	0.0000	144538.50	0.000E+00
5.02	0.0182	144005.50	1.319E-04	5.00	0.0279	144549.50	1.522E-04
10.01	0.0360	144016.50	2.847E-04	10.02	0.0557	144584.50	6.365E-04
15.01	0.0536	144034.75	5.362E-04	15.04	0.0828	144644.50	1.467E-03
20.02	0.0713	144064.50	9.514E-04	20.02	0.1094	144729.00	2.636E-03
25.01	0.0884	144100.00	1.444E-03	24.97	0.1354	144832.00	4.061E-03
30.03	0.1058	144144.00	2.056E-03	29.99	0.1590	144944.50	5.618E-03
35.00	0.1227	144201.00	2.847E-03	35.02	0.1825	145075.00	7.424E-03
40.00	0.1399	144259.00	3.653E-03	40.00	0.2038	145193.50	9.063E-03
44.99	0.1559	144324.00	4.556E-03	45.01	0.2241	145317.00	1.077E-02
50.00	0.1711	144387.50	5.438E-03	50.00	0.2434	145426.50	1.229E-02
54.98	0.1859	144460.50	6.452E-03	55.01	0.2606	145549.00	1.398E-02
60.01	0.2002	144528.25	7.393E-03	60.01	0.2768	145669.00	1.564E-02
65.02	0.2137	144601.50	8.410E-03	64.99	0.2923	145794.50	1.738E-02
70.00	0.2270	144675.50	9.438E-03	69.97	0.3069	145880.00	1.856E-02
72.04	0.2319	144706.00	9.861E-03	72.04	0.3120	145930.50	1.926E-02

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	144793.00	0.000E+00
5.02	0.0381	144816.50	3.246E-04
9.97	0.0750	144879.00	1.188E-03
15.00	0.1107	144889.50	1.333E-03
20.00	0.1442	145115.50	4.869E-03
24.97	0.1751	145290.50	6.872E-03
30.00	0.2045	145445.00	9.006E-03
34.99	0.2302	145590.00	1.101E-02
39.97	0.2548	145710.50	1.309E-02
45.00	0.2771	145875.50	1.495E-02
49.98	0.2972	146018.50	1.693E-02
55.02	0.3154	146152.50	1.878E-02
60.03	0.3315	146258.00	2.024E-02
65.00	0.3461	146370.00	2.174E-02
69.98	0.3600	146474.50	2.323E-02
72.04	0.3655	146511.50	2.374E-02

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	145549.50	0.000E+00
5.00	0.1201	145879.00	4.528E-03
9.98	0.2106	146242.00	9.516E-03
15.00	0.2765	146565.50	1.396E-02
20.03	0.3250	146814.00	1.738E-02
25.00	0.3598	146996.00	1.988E-02
30.00	0.3873	147155.00	2.206E-02
34.99	0.4113	147300.50	2.406E-02
40.01	0.4309	147430.50	2.585E-02
45.00	0.4471	147516.50	2.744E-02
50.02	0.4609	147652.50	2.890E-02
55.00	0.4735	147753.50	3.029E-02
59.99	0.4849	147844.00	3.153E-02
65.00	0.4942	147922.00	3.260E-02
70.02	0.5033	148004.00	3.373E-02
72.04	0.5049	148031.00	3.410E-02

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	145077.50	0.000E+00
4.94	0.0513	145140.00	8.616E-04
10.01	0.1001	145300.00	1.382E+00
14.99	0.1444	145493.00	5.728E-03
20.02	0.1846	145687.00	8.492E-03
25.00	0.2207	145863.50	1.034E-02
30.01	0.2541	146047.50	1.337E-02
35.00	0.2822	146219.00	1.574E-02
40.01	0.3087	146378.50	1.794E-02
45.00	0.3314	146505.75	1.969E-02
50.00	0.3513	146639.50	2.153E-02
55.00	0.3702	146754.00	2.311E-02
60.01	0.3853	146866.50	2.466E-02
65.00	0.3989	146971.00	2.610E-02
70.01	0.4122	147065.50	2.741E-02
72.04	0.4165	147110.00	2.802E-02

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	146200.50	0.000E+00
5.00	0.1701	147295.50	1.498E-02
10.02	0.2671	147790.00	2.174E-02
14.99	0.3275	148044.00	2.522E-02
19.94	0.3673	148256.50	2.813E-02
24.98	0.3959	148432.00	3.053E-02
29.99	0.4196	148580.00	3.255E-02
34.99	0.4400	148713.00	3.437E-02
39.97	0.4572	148836.00	3.605E-02
45.01	0.4721	148945.50	3.755E-02
49.99	0.4843	149028.00	3.868E-02
55.04	0.4947	149094.00	3.958E-02
59.96	0.5054	149175.50	4.070E-02
65.00	0.5149	149248.00	4.169E-02
69.98	0.5221	149305.00	4.247E-02
72.00	0.5252	149340.00	4.295E-02

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	145447.50	0.000E+00
4.99	0.0900	145647.00	2.743E-03
10.00	0.1648	145979.00	7.308E-03
15.00	0.2257	146269.00	1.130E-02
19.99	0.2737	146513.50	1.466E-02
25.00	0.3098	146729.50	1.763E-02
29.97	0.3418	146902.50	2.001E-02
35.00	0.3678	147057.50	2.214E-02
40.01	0.3896	147193.50	2.401E-02
45.00	0.4084	147323.50	2.580E-02
49.99	0.4216	147432.00	2.729E-02
55.01	0.4387	147529.50	2.863E-02
60.00	0.4517	147634.00	3.007E-02
64.99	0.4650	147702.00	3.190E-02
69.98	0.4728	147793.50	3.226E-02
72.04	0.4771	147824.00	3.268E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
4.98	0.1685	147240.50	0.000E+00
9.98	0.2773	148168.50	1.261E-02
15.01	0.3447	148431.50	1.618E-02
20.02	0.3901	148626.50	1.883E-02
25.05	0.4207	148779.50	2.090E-02
30.00	0.4464	148924.00	2.287E-02
35.07	0.4664	149044.00	2.450E-02
40.01	0.4838	149135.50	2.574E-02
44.99	0.4979	149228.50	2.700E-02
50.02	0.5093	149307.50	2.808E-02
55.01	0.5197	149398.00	2.931E-02
60.01	0.5289	149457.00	3.011E-02
65.05	0.5365	149524.50	3.102E-02
69.98	0.5434	149577.50	3.174E-02
72.01	0.5451	149597.00	3.201E-02

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
7.65	0.3817	148175.50	0.000E+00
9.95	0.4025	148558.50	5.170E-03
14.96	0.4363	148884.00	9.563E-03
20.02	0.4636	149052.00	1.183E-02
25.01	0.4845	149186.00	1.364E-02
29.97	0.5014	149294.50	1.510E-02
35.06	0.5159	149389.50	1.639E-02
39.98	0.5284	149482.00	1.763E-02
45.04	0.5389	149560.00	1.869E-02
50.02	0.5478	149633.50	1.968E-02
55.02	0.5560	149707.50	2.068E-02
59.99	0.5634	149788.50	2.150E-02
65.00	0.5699	149829.50	2.232E-02
70.00	0.5763	149892.00	2.317E-02
72.02	0.5778	149913.00	2.345E-02

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
10.20	0.5631	148273.00	0.000E+00
15.00	0.5807	149063.00	1.066E-02
20.00	0.5938	149316.00	1.497E-02
25.00	0.6049	149424.50	1.553E-02
30.01	0.6143	149495.50	1.649E-02
34.99	0.6229	149552.50	1.726E-02
40.00	0.6303	149608.50	1.801E-02
45.00	0.6364	149658.00	1.868E-02
50.02	0.6430	149691.50	1.913E-02
54.98	0.6487	149739.50	1.978E-02
60.01	0.6532	149774.50	2.025E-02
65.00	0.6581	149799.00	2.058E-02
70.00	0.6626	149835.00	2.107E-02
72.04	0.6639	149852.50	2.131E-02

TEMPERATURA = 215.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
9.98	0.4498	148820.00	0.000E+00
15.03	0.4795	149273.50	6.095E-03
20.02	0.5007	149429.50	8.191E-03
25.04	0.5181	149546.50	9.763E-03
29.99	0.5335	149642.00	1.105E-02
34.99	0.5466	149724.00	1.215E-02
40.00	0.5558	149800.00	1.317E-02
45.01	0.5653	149868.50	1.409E-02
50.00	0.5748	149942.50	1.500E-02
55.00	0.5825	150003.50	1.591E-02
59.99	0.5898	150040.00	1.610E-02
65.00	0.5960	150094.50	1.713E-02
70.00	0.6018	150144.00	1.779E-02
72.04	0.6033	150159.50	1.800E-02

TEMPERATURA = 190.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
11.39	0.6324	148028.00	0.000E+00
14.99	0.6426	148968.50	1.271E-02
19.98	0.6528	149234.50	1.630E-02
25.00	0.6605	149394.50	1.846E-02
29.99	0.6666	149479.50	1.961E-02
35.00	0.6723	149518.00	2.013E-02
40.01	0.6776	149548.50	2.054E-02
44.97	0.6821	149577.50	2.091E-02
49.99	0.6862	149617.50	2.148E-02
54.98	0.6903	149656.50	2.200E-02
59.53	0.6935	149672.00	2.221E-02
64.99	0.6960	149708.50	2.271E-02
69.95	0.6997	149713.00	2.277E-02
72.04	0.7009	149727.50	2.296E-02

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
10.00	0.5001	147991.75	0.000E+00
15.00	0.5234	148547.00	7.504E-03
20.00	0.5402	148719.50	9.835E-03
25.01	0.5540	148826.50	1.128E-02
30.01	0.5657	148922.00	1.257E-02
35.02	0.5749	149011.00	1.377E-02
40.00	0.5847	149082.50	1.474E-02
45.00	0.5917	149152.50	1.569E-02
50.00	0.5998	149197.00	1.629E-02
54.98	0.6052	149251.00	1.702E-02
59.97	0.6105	149305.00	1.775E-02
65.00	0.6158	149342.00	1.825E-02
70.00	0.6211	149372.50	1.866E-02
72.04	0.6244	149385.50	1.884E-02

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
12.27	0.6741	147279.50	0.000E+00
15.00	0.6829	147961.50	9.261E-03
20.00	0.6928	148230.00	1.291E-02
25.01	0.6989	148377.00	1.490E-02
30.01	0.7039	148455.00	1.596E-02
35.00	0.7087	148492.00	1.647E-02
40.00	0.7122	148528.00	1.695E-02
45.01	0.7161	148561.50	1.741E-02
50.00	0.7203	148601.50	1.795E-02
55.00	0.7238	148641.50	1.850E-02
60.00	0.7259	148664.00	1.880E-02
64.99	0.7287	148697.50	1.926E-02
70.01	0.7320	148709.50	1.942E-02
72.04	0.7324	148719.50	1.955E-02

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
13.82	0.7027	147908.50	0.000E+00
15.00	0.7954	148239.50	4.476E-03
19.99	0.7145	148641.50	9.912E-03
25.00	0.7219	148780.50	1.179E-02
30.00	0.7272	148871.00	1.301E-02
35.02	0.7317	148917.00	1.364E-02
40.00	0.7345	148917.00	1.404E-02
44.99	0.7386	148971.50	1.437E-02
50.02	0.7419	148997.00	1.472E-02
55.00	0.7439	149030.50	1.517E-02
60.00	0.7476	149057.50	1.554E-02
65.00	0.7500	149082.00	1.587E-02
70.01	0.7527	149108.50	1.623E-02
72.04	0.7537	149122.00	1.641E-02

TEMPERATURA = 120.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
20.02	0.8546	144104.50	0.000E+00
25.00	0.8576	144343.00	3.310E-03
30.01	0.8605	144398.50	4.060E-03
35.00	0.8621	144477.50	5.177E-03
40.00	0.8650	144523.50	5.815E-03
45.00	0.8662	144540.00	6.044E-03
49.99	0.8672	144558.00	6.294E-03
54.98	0.8685	144573.50	6.509E-03
60.01	0.8695	144583.50	6.648E-03
65.00	0.8703	144595.50	6.814E-03
70.00	0.8711	144621.00	7.168E-03
72.04	0.8715	144620.00	7.155E-03

TEMPERATURA = 100.0 K

TEMPERATURA = 160.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
15.00	0.7486	148460.00	0.000E+00
20.00	0.7576	149023.00	7.585E-03
24.98	0.7623	149142.00	9.186E-03
30.00	0.7672	149253.50	1.069E-02
35.00	0.7700	149304.00	1.137E-02
40.00	0.7737	149328.00	1.169E-02
45.00	0.7762	149352.50	1.202E-02
50.02	0.7780	149375.50	1.233E-02
55.02	0.7801	149402.00	1.269E-02
60.03	0.7819	149434.50	1.313E-02
65.00	0.7840	149450.00	1.344E-02
70.01	0.7858	149477.50	1.371E-02
72.04	0.7864	149481.50	1.376E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
22.10	0.8969	143820.50	0.000E+00
25.00	0.8983	143924.00	1.439E-03
30.00	0.9004	143999.00	2.482E-03
35.00	0.9020	144052.50	3.226E-03
40.01	0.9032	144111.50	4.047E-03
45.01	0.9053	144142.00	4.471E-03
50.00	0.9065	144164.00	4.777E-03
55.00	0.9073	144183.50	5.048E-03
60.00	0.9081	144196.50	5.229E-03
65.00	0.9098	144203.00	5.319E-03
69.98	0.9106	144216.00	5.500E-03
72.04	0.9114	144220.00	5.556E-03

TEMPERATURA = 80.0 K

TEMPERATURA = 140.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
17.81	0.8035	143372.50	0.000E+00
20.03	0.8069	143543.50	2.385E-03
24.98	0.8106	143701.00	4.624E-03
30.00	0.8151	143808.50	6.052E-03
35.03	0.8175	143878.50	7.059E-03
39.98	0.8211	143911.50	7.519E-03
45.00	0.8233	143937.00	7.875E-03
50.00	0.8245	143958.50	8.175E-03
55.00	0.8265	143972.00	8.363E-03
60.00	0.8277	143990.00	8.614E-03
65.00	0.8290	144015.00	8.933E-03
70.01	0.8302	144024.50	9.095E-03
72.04	0.8310	144035.00	9.242E-03

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
20.00	0.9386	144687.00	0.000E+00
25.01	0.9425	145396.00	9.800E-03
30.00	0.9442	145488.00	1.107E-02
35.00	0.9452	145545.50	1.187E-02
40.00	0.9472	145594.00	1.254E-02
45.00	0.9482	145625.50	1.297E-02
50.00	0.9493	145655.00	1.338E-02
55.00	0.9505	145675.50	1.366E-02
60.00	0.9511	145693.50	1.391E-02
65.00	0.9517	145708.00	1.411E-02
70.00	0.9521	145733.50	1.447E-02
72.04	0.9523	145736.50	1.451E-02

TEMPERATURA = 60.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
23.23	0.9571	145907.50	0.000E+00
25.00	0.9575	145975.50	9.321E-04
29.99	0.9587	146032.50	1.713E-03
34.99	0.9590	146073.50	2.275E-03
39.98	0.9595	146104.00	2.693E-03
44.99	0.9615	146133.00	3.091E-03
50.02	0.9615	146156.00	3.406E-03
55.00	0.9615	146172.50	3.632E-03
60.00	0.9615	146189.00	3.859E-03
65.00	0.9615	146202.50	4.014E-03
70.00	0.9615	146215.00	4.215E-03
72.04	0.9615	146215.50	4.222E-03

TEMPERATURA = 40.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
25.01	0.9885	145392.00	0.000E+00
30.00	0.9910	145457.50	9.010E-04
35.00	0.9910	145486.50	1.300E-03
40.00	0.9910	145521.00	1.775E-03
45.00	0.9910	145545.50	2.112E-03
50.03	0.9910	145561.00	2.325E-03
55.01	0.9910	145577.00	2.545E-03
60.00	0.9910	145592.50	2.758E-03
65.00	0.9910	145609.00	2.965E-03
70.00	0.9910	145621.50	3.157E-03
72.04	0.9910	145624.50	3.198E-03

TEMPERATURA = 20.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
24.32	0.9982	145675.50	0.000E+00
25.00	0.9984	145690.50	2.059E-04
29.99	0.9988	145711.50	9.061E-04
35.00	0.9988	145776.50	1.414E-03
40.00	0.9988	145808.50	1.826E-03
45.00	0.9988	145829.50	2.114E-03
50.00	0.9988	145843.50	2.306E-03
54.97	0.9988	145855.50	2.471E-03
60.01	0.9988	145856.00	2.478E-03
65.02	0.9988	145864.50	2.595E-03
70.02	0.9988	145872.00	2.698E-03
72.04	0.9988	145878.00	2.780E-03

 $C_{1111} (\text{K}/\text{\AA}), \hbar/\text{\AA}:$

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	143707.50	0.000E+00
4.99	0.0156	143713.50	8.350E-05
10.01	0.0316	143724.25	2.331E-04
15.00	0.0469	143744.00	5.080E-04
20.00	0.0628	143768.50	8.489E-04
25.01	0.0782	143800.25	1.291E-03
30.00	0.0934	143838.50	1.823E-03
35.00	0.1085	143880.50	2.408E-03
40.00	0.1228	143925.50	3.034E-03
45.03	0.1366	143974.50	3.716E-03
49.96	0.1500	144030.00	4.488E-03
55.00	0.1628	144079.50	5.177E-03
60.00	0.1750	144134.00	5.936E-03
65.02	0.1863	144188.50	6.694E-03
70.01	0.1973	144238.00	7.383E-03
72.04	0.2021	144262.00	7.717E-03

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	144139.00	0.000E+00
5.00	0.0218	144147.50	1.179E-04
10.00	0.0443	144168.25	4.059E-04
15.00	0.0664	144208.50	9.643E-04
20.00	0.0877	144256.00	1.623E-03
25.01	0.1086	144315.00	2.442E-03
29.97	0.1289	144384.00	3.399E-03
34.99	0.1486	144455.00	4.395E-03
40.00	0.1677	144538.00	5.536E-03
44.97	0.1859	144619.00	6.660E-03
50.00	0.2026	144705.00	7.854E-03
55.02	0.2184	144792.25	9.064E-03
60.00	0.2335	144889.75	1.014E-02
65.03	0.2477	144946.00	1.120E-02
70.00	0.2613	145020.50	1.223E-02
72.07	0.2664	145056.50	1.273E-02

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	143911.50	0.000E+00
5.03	0.0186	143918.50	9.728E-05
9.98	0.0370	143930.00	2.571E-04
15.00	0.0557	143955.50	6.115E-04
20.02	0.0741	143991.00	1.105E-03
25.02	0.0920	144036.50	1.737E-03
30.00	0.1096	144095.00	2.550E-03
35.05	0.1263	144153.00	3.356E-03
40.01	0.1426	144211.50	4.169E-03
45.00	0.1580	144274.00	5.038E-03
50.00	0.1728	144340.50	5.962E-03
55.00	0.1871	144402.50	6.824E-03
60.01	0.2007	144467.50	7.727E-03
65.02	0.2136	144535.00	8.665E-03
70.01	0.2260	144580.00	9.290E-03
72.07	0.2310	144623.25	9.891E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	144399.75	0.000E+00
4.99	0.0260	144411.75	1.662E-04
10.00	0.0530	144417.50	6.614E-04
14.99	0.0794	144511.50	1.548E-03
20.03	0.1047	144591.50	2.656E-03
25.00	0.1307	144686.00	3.965E-03
30.03	0.1539	144792.00	5.433E-03
35.00	0.1768	144904.50	6.991E-03
40.00	0.1982	144993.25	8.220E-03
45.01	0.2177	145098.00	9.671E-03
50.00	0.2353	145203.00	1.113E-02
55.00	0.2521	145298.50	1.245E-02
60.03	0.2676	145398.00	1.383E-02
65.00	0.2821	145493.00	1.514E-02
70.01	0.2968	145582.25	1.638E-02
72.02	0.3040	145616.25	1.685E-02

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	144634.50	0.000E+00
5.00	0.0327	144656.00	2.973E-04
10.01	0.0655	144722.50	1.217E-03
15.01	0.0974	144821.50	2.586E-03
20.05	0.1291	144946.50	4.314E-03
25.00	0.1590	145089.50	6.292E-03
29.97	0.1870	145225.00	8.165E-03
35.03	0.2111	145374.00	1.023E-02
39.98	0.2347	145509.50	1.210E-02
44.99	0.2555	145649.00	1.403E-02
50.02	0.2750	145776.00	1.578E-02
55.00	0.2930	145891.25	1.738E-02
60.01	0.3093	145996.50	1.883E-02
65.00	0.3236	146086.00	2.007E-02
70.00	0.3376	146177.50	2.134E-02
72.04	0.3425	146213.50	2.183E-02

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	145421.50	0.000E+00
5.03	0.1372	145612.75	2.630E-03
10.00	0.2159	145992.50	9.228E-03
15.00	0.2940	146451.50	1.417E-02
20.00	0.3388	146722.50	1.789E-02
24.98	0.3711	146926.50	2.070E-02
30.00	0.3907	147036.50	2.304E-02
34.99	0.4181	147210.00	2.501E-02
40.00	0.4357	147363.50	2.671E-02
45.00	0.4528	147471.00	2.819E-02
50.00	0.4637	147566.00	2.949E-02
55.01	0.4749	147642.00	3.054E-02
60.00	0.4843	147710.50	3.148E-02
65.00	0.4931	147763.00	3.227E-02
70.00	0.5018	147825.00	3.306E-02
72.04	0.5060	147847.50	3.337E-02

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	144932.50	0.000E+00
5.00	0.0590	144972.50	5.520E-04
10.01	0.1143	145097.50	2.277E-03
15.00	0.1643	145270.50	4.664E-03
20.00	0.2062	145472.50	7.152E-03
24.98	0.2431	145642.50	1.035E-02
30.01	0.2759	145869.00	1.292E-02
35.02	0.3029	146041.00	1.530E-02
40.00	0.3268	146191.00	1.737E-02
45.01	0.3471	146326.50	1.924E-02
50.03	0.3654	146449.50	2.093E-02
54.98	0.3811	146557.00	2.242E-02
60.00	0.3955	146663.50	2.389E-02
65.02	0.4084	146759.75	2.509E-02
70.00	0.4197	146829.00	2.617E-02
72.04	0.4241	146858.00	2.657E-02

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	145806.00	0.000E+00
2.88	0.1553	146168.75	4.976E-03
4.14	0.2009	146714.75	1.247E-02
5.02	0.2259	146933.75	1.547E-02
10.01	0.3134	147566.50	2.415E-02
15.04	0.3654	147887.50	2.855E-02
20.03	0.4010	148105.50	3.151E-02
24.98	0.4272	148283.00	3.398E-02
30.00	0.4472	148435.00	3.606E-02
35.02	0.4634	148560.50	3.778E-02
40.01	0.4779	148662.00	3.919E-02
45.01	0.4910	148756.00	4.046E-02
50.00	0.5024	148838.00	4.159E-02
55.01	0.5102	148906.00	4.252E-02
60.00	0.5205	148966.50	4.335E-02
65.02	0.5274	149020.00	4.409E-02
70.01	0.5352	149069.50	4.476E-02
72.05	0.5387	149089.00	4.503E-02

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	145214.50	0.000E+00
4.99	0.0997	145346.00	1.398E-03
9.98	0.1836	145654.50	5.646E-03
14.99	0.2467	145971.25	1.001E-02
19.99	0.2946	146234.25	1.363E-02
25.02	0.3301	146459.00	1.672E-02
30.01	0.3588	146655.25	1.943E-02
35.00	0.3819	146818.50	2.167E-02
40.00	0.4008	146954.50	2.355E-02
45.00	0.4166	147073.50	2.519E-02
49.99	0.4315	147170.00	2.651E-02
55.00	0.4449	147269.00	2.788E-02
60.01	0.4563	147350.50	2.900E-02
65.00	0.4674	147429.00	3.008E-02
69.98	0.4775	147499.25	3.105E-02
72.04	0.4814	147524.50	3.140E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	145618.00	0.000E+00
3.87	0.2644	145732.00	1.566E-03
5.00	0.2934	146425.25	1.109E-02
10.01	0.3652	147109.00	2.048E-02
15.00	0.4052	147402.00	2.450E-02
20.00	0.4311	147667.00	2.732E-02
25.02	0.4577	147757.00	2.938E-02
30.01	0.4746	147876.50	3.102E-02
35.00	0.4899	147970.00	3.230E-02
40.01	0.5026	148049.00	3.339E-02
45.00	0.5135	148127.25	3.446E-02
50.00	0.5230	148193.00	3.537E-02
55.01	0.5338	148248.50	3.613E-02
60.00	0.5391	148302.00	3.680E-02
65.00	0.5460	148350.00	3.752E-02
70.00	0.5534	148391.00	3.809E-02
72.04	0.5561	148409.00	3.833E-02

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
5.00	0.3757	145864.75	0.000E+00
7.50	0.4064	146147.00	7.983E-03
10.00	0.4257	146656.50	1.086E-02
15.00	0.4558	146905.50	1.427E-02
20.00	0.4774	147062.00	1.642E-02
25.00	0.4933	147189.00	1.816E-02
30.00	0.5083	147293.00	1.958E-02
35.02	0.5210	147383.00	2.082E-02
40.01	0.5322	147457.50	2.184E-02
45.00	0.5413	147527.50	2.280E-02
50.00	0.5486	147583.50	2.357E-02
54.98	0.5556	147635.50	2.428E-02
60.03	0.5625	147681.00	2.490E-02
64.99	0.5688	147719.50	2.543E-02
70.00	0.5751	147757.00	2.595E-02
72.04	0.5792	147766.00	2.607E-02

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
7.54	0.5607	147773.50	0.000E+00
10.00	0.5753	148013.00	3.241E-03
15.03	0.5895	148201.50	5.793E-03
20.00	0.6009	148310.50	7.268E-03
25.00	0.6094	148392.50	8.378E-03
30.01	0.6175	148461.50	9.312E-03
35.00	0.6244	148514.50	1.003E-02
39.97	0.6297	148548.50	1.049E-02
44.99	0.6344	148585.00	1.098E-02
50.00	0.6398	148619.50	1.145E-02
54.98	0.6441	148663.00	1.177E-02
60.00	0.6482	148670.00	1.213E-02
65.03	0.6506	148691.00	1.242E-02
70.00	0.6545	148708.50	1.265E-02
72.04	0.6567	148716.50	1.276E-02

TEMPERATURA = 215.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
5.50	0.4351	146329.00	0.000E+00
7.54	0.4555	146834.00	6.902E-03
10.04	0.4726	147333.00	9.622E-03
15.00	0.4946	147219.00	1.257E-02
20.00	0.5137	147103.50	1.469E-02
25.00	0.5280	147522.00	1.631E-02
29.97	0.5396	147618.00	1.762E-02
35.00	0.5498	147695.00	1.867E-02
40.01	0.5586	147760.00	1.956E-02
44.99	0.5672	147814.00	2.030E-02
50.02	0.5774	147860.50	2.093E-02
55.02	0.5798	147902.50	2.151E-02
60.00	0.5856	147932.50	2.192E-02
65.00	0.5909	147970.00	2.243E-02
70.02	0.5966	147998.00	2.281E-02
72.04	0.5992	148009.00	2.296E-02

TEMPERATURA = 190.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
7.54	0.5951	148125.00	0.000E+00
8.80	0.6065	148391.00	3.592E-03
10.00	0.6114	148503.00	5.104E-03
15.00	0.6273	148700.00	7.764E-03
20.02	0.6371	148781.00	8.857E-03
24.98	0.6444	148838.75	9.637E-03
30.01	0.6505	148887.00	1.029E-02
35.00	0.6558	148926.50	1.082E-02
40.00	0.6603	148960.00	1.127E-02
45.00	0.6648	148991.00	1.169E-02
50.00	0.6697	149008.50	1.193E-02
54.98	0.6725	149033.50	1.227E-02
60.00	0.6762	149049.50	1.248E-02
65.00	0.6794	149065.00	1.269E-02
70.00	0.6819	149082.50	1.293E-02
72.04	0.6839	149089.00	1.302E-02

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
6.16	0.4841	146904.25	0.000E+00
7.54	0.4968	147177.00	3.713E-03
8.25	0.5013	147271.00	4.993E-03
10.01	0.5120	147413.00	6.926E-03
15.00	0.5313	147627.50	9.847E-03
20.03	0.5456	147760.50	1.166E-02
25.00	0.5579	147855.50	1.235E-02
30.01	0.5674	147926.00	1.391E-02
35.05	0.5760	147989.50	1.477E-02
40.00	0.5842	148040.00	1.546E-02
45.01	0.5908	148087.50	1.611E-02
50.00	0.5973	148124.50	1.661E-02
54.97	0.6031	148158.75	1.708E-02
60.01	0.6084	148192.00	1.753E-02
65.02	0.6129	148222.50	1.795E-02
70.01	0.6166	148244.50	1.825E-02
72.04	0.6199	148257.50	1.842E-02

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
7.54	0.6421	148245.50	0.000E+00
8.62	0.6536	148778.00	7.184E-03
10.01	0.6625	148939.00	9.356E-03
14.97	0.6778	149140.50	1.207E-02
20.05	0.6867	149224.50	1.321E-02
25.00	0.6932	149283.50	1.400E-02
30.00	0.6984	149329.50	1.462E-02
35.00	0.7024	149367.50	1.514E-02
40.00	0.7069	149399.50	1.557E-02
45.01	0.7109	149424.00	1.590E-02
50.00	0.7137	149447.00	1.621E-02
55.00	0.7164	149463.50	1.643E-02
60.01	0.7190	149480.50	1.666E-02
65.00	0.7214	149494.50	1.688E-02
70.00	0.7238	149505.00	1.699E-02
72.04	0.7252	149510.50	1.707E-02

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
8.25	0.6795	148831.50	0.000E+00
10.00	0.6946	149298.50	6.276E-03
15.00	0.7126	149545.00	9.588E-03
20.00	0.7224	149625.50	1.067E-02
25.01	0.7273	149666.50	1.122E-02
30.00	0.7322	149702.00	1.170E-02
34.99	0.7363	149730.00	1.207E-02
40.00	0.7396	149749.00	1.233E-02
45.00	0.7428	149767.00	1.257E-02
49.99	0.7449	149783.50	1.279E-02
55.00	0.7478	149798.00	1.299E-02
60.00	0.7494	149808.50	1.313E-02
65.00	0.7518	149817.75	1.325E-02
70.00	0.7531	149828.50	1.340E-02
72.04	0.7547	149828.50	1.340E-02

TEMPERATURA = 120.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
13.71	0.8232	150779.00	0.000E+00
15.00	0.8268	150880.50	1.346E-03
19.99	0.8341	150987.50	2.766E-03
25.00	0.8362	151030.50	3.336E-03
30.00	0.8390	151060.50	3.734E-03
35.00	0.8407	151079.50	3.966E-03
39.98	0.8423	151085.50	4.066E-03
45.00	0.8431	151092.50	4.158E-03
50.02	0.8447	151099.50	4.251E-03
55.00	0.8468	151105.00	4.324E-03
60.04	0.8472	151113.00	4.400E-03
64.99	0.8472	151121.00	4.536E-03
70.00	0.8472	151122.50	4.556E-03
72.04	0.8472	151122.50	4.556E-03

TEMPERATURA = 100.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
9.98	0.7263	149610.50	0.000E+00
15.00	0.7437	149879.00	3.589E-03
19.99	0.7510	149947.50	4.505E-03
25.01	0.7559	149993.00	5.113E-03
30.00	0.7595	150019.00	5.461E-03
35.02	0.7628	150032.50	5.641E-03
40.00	0.7652	150057.00	5.969E-03
45.00	0.7677	150072.00	6.169E-03
50.00	0.7693	150084.00	6.330E-03
55.01	0.7709	150100.00	6.544E-03
60.00	0.7717	150111.50	6.697E-03
65.00	0.7735	150122.50	6.844E-03
70.01	0.7750	150130.00	6.945E-03
72.04	0.7762	150136.50	7.032E-03

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
17.82	0.8668	151437.00	0.000E+00
19.99	0.8680	151507.00	9.245E-04
24.97	0.8708	151554.40	1.550E-03
30.00	0.8736	151578.00	1.862E-03
34.99	0.8748	151591.50	2.040E-03
40.00	0.8757	151602.00	2.179E-03
45.03	0.8773	151608.00	2.258E-03
50.00	0.8785	151612.00	2.311E-03
54.98	0.8789	151615.00	2.351E-03
60.01	0.8789	151615.50	2.357E-03
65.00	0.8789	151616.00	2.364E-03
70.00	0.8789	151616.00	2.364E-03
72.04	0.8789	151616.50	2.371E-03

TEMPERATURA = 80.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
10.97	0.7810	150084.50	0.000E+00
14.99	0.7904	150499.00	5.524E-03
20.02	0.7956	150581.00	6.616E-03
25.01	0.7985	150624.00	7.189E-03
30.01	0.8017	150651.00	7.549E-03
34.99	0.8041	150666.00	7.749E-03
40.00	0.8061	150676.00	7.832E-03
45.03	0.8086	150683.00	7.976E-03
50.03	0.8094	150703.00	8.242E-03
54.98	0.8106	150706.00	8.282E-03
60.00	0.8122	150714.00	8.389E-03
64.99	0.8134	150716.00	8.415E-03
70.01	0.8142	150720.50	8.475E-03
72.05	0.8154	150723.00	8.509E-03

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
23.99	0.8982	151903.00	0.000E+00
25.00	0.8986	151924.50	2.831E-04
30.01	0.9010	151945.50	5.596E-04
35.00	0.9018	151956.50	7.044E-04
40.01	0.9026	151964.00	8.031E-04
45.00	0.9043	151966.50	8.361E-04
50.00	0.9051	151968.00	8.558E-04
55.00	0.9051	151972.00	9.085E-04
60.00	0.9051	151972.50	9.151E-04
64.99	0.9051	151972.00	9.085E-04
70.01	0.9051	151971.00	8.953E-04
72.04	0.9051	151969.50	8.756E-04

TEMPERATURA = 60.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
19.06	0.9302	152451.00	0.000E+00
20.80	0.9326	152646.00	2.558E-03
25.00	0.9350	152955.00	6.612E-03
30.01	0.9362	153252.75	1.052E-02
35.03	0.9374	153346.50	1.175E-02
40.01	0.9395	153350.00	1.179E-02
45.01	0.9403	153350.50	1.180E-02
49.99	0.9411	153351.50	1.181E-02
55.00	0.9411	153353.00	1.183E-02
59.99	0.9411	153352.50	1.183E-02
65.02	0.9411	153348.00	1.177E-02
69.98	0.9411	153347.00	1.175E-02
72.04	0.9411	153346.00	1.174E-02

TEMPERATURA = 40.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
20.02	0.9604	153140.00	0.000E+00
24.98	0.9640	153479.75	4.437E-03
30.00	0.9669	153609.00	6.125E-03
35.00	0.9683	153635.50	6.471E-03
40.00	0.9690	153635.00	6.465E-03
45.00	0.9698	153634.00	6.452E-03
50.03	0.9714	153630.50	6.408E-03
55.00	0.9726	153626.00	6.347E-03
60.01	0.9728	153624.50	6.328E-03
65.02	0.9728	153630.00	6.399E-03
70.00	0.9730	153627.50	6.367E-03
72.04	0.9730	153626.00	6.347E-03

TEMPERATURA = 20.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
20.00	0.9724	152544.00	0.000E+00
24.98	0.9759	152727.50	2.406E-03
30.00	0.9771	152783.50	3.140E-03
35.02	0.9783	152774.50	3.022E-03
45.01	0.9795	152741.50	2.589E-03
49.99	0.9799	152710.00	2.570E-03
60.00	0.9799	152731.50	2.458E-03
72.04	0.9799	152730.00	2.439E-03

 $C_{1111} (\text{K}/\text{\AA}), \text{\AA}/\text{C}:$

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	141875.00	0.000E+00
5.02	0.0109	141876.50	2.115E-05
10.01	0.0199	141877.00	2.819E-05
15.00	0.0300	141879.50	6.344E-05
19.99	0.0402	141886.50	1.621E-04
25.00	0.0502	141890.50	2.185E-04
27.50	0.0549	141892.50	2.467E-04
30.00	0.0598	141894.75	2.784E-04
35.02	0.0699	141900.50	3.535E-04
40.00	0.0801	141909.50	4.863E-04
42.53	0.0848	141912.75	5.322E-04
45.00	0.0896	141914.75	5.694E-04
47.50	0.0943	141919.50	6.273E-04
50.00	0.0990	141923.50	6.837E-04
55.00	0.1084	141928.50	7.512E-04
57.50	0.1130	141930.50	7.824E-04
60.00	0.1176	141936.75	8.705E-04
65.00	0.1266	141943.75	9.692E-04
70.00	0.1359	141950.50	1.064E-03
72.07	0.1396	141956.50	1.149E-03

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	142092.50	0.000E+00
5.02	0.0108	142093.00	7.038E-06
9.98	0.0213	142094.75	3.167E-05
15.00	0.0320	142098.75	8.797E-05
20.00	0.0425	142104.50	1.689E-04
25.00	0.0528	142110.75	2.569E-04
27.52	0.0579	142116.00	3.308E-04
29.99	0.0632	142119.00	3.730E-04
35.00	0.0732	142126.25	4.750E-04
40.00	0.0835	142136.00	6.123E-04
42.50	0.0884	142143.00	7.108E-04
45.00	0.0934	142146.50	7.601E-04
47.50	0.0981	142151.50	8.304E-04
49.99	0.1032	142156.50	9.008E-04
55.00	0.1129	142166.50	1.042E-03
57.50	0.1173	142170.00	1.091E-03
60.00	0.1221	142173.00	1.133E-03
65.00	0.1317	142186.50	1.323E-03
70.00	0.1406	142196.25	1.460E-03
72.07	0.1435	142203.00	1.555E-03

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	142307.50	0.000E+00
5.00	0.0121	142306.50	-1.405E-05
10.00	0.0239	142313.50	8.432E-05
15.03	0.0354	142301.50	-8.432E-05
20.02	0.0471	142307.50	0.000E+00
25.02	0.0585	142313.00	7.730E-05
30.00	0.0698	142324.50	2.319E-04
35.03	0.0811	142337.50	4.216E-04
40.02	0.0921	142353.00	6.395E-04
44.99	0.1031	142368.50	8.573E-04
50.00	0.1137	142377.50	9.833E-04
55.01	0.1242	142387.00	1.117E-03
60.01	0.1343	142398.50	1.279E-03
65.00	0.1446	142414.50	1.504E-03
72.05	0.1582	142432.50	1.757E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	142538.00	0.000E+00
5.00	0.0132	142542.00	5.613E-05
9.98	0.0266	142513.00	7.016E-05
15.00	0.0399	142549.00	1.543E-04
20.00	0.0532	142556.00	2.526E-04
25.00	0.0660	142564.00	3.649E-04
27.50	0.0721	142569.25	4.385E-04
30.00	0.0789	142573.50	4.981E-04
35.00	0.0917	142588.50	7.086E-04
40.00	0.1041	142603.75	9.226E-04
42.50	0.1097	142609.50	1.003E-03
45.00	0.1164	142617.25	1.112E-03
47.50	0.1217	142625.75	1.231E-03
49.99	0.1262	142636.00	1.375E-03
54.98	0.1401	142650.00	1.572E-03
57.52	0.1448	142660.25	1.715E-03
60.00	0.1511	142667.50	1.817E-03
65.02	0.1624	142686.00	2.077E-03
70.00	0.1737	142704.00	2.329E-03
72.05	0.1771	142711.25	2.431E-03

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	142795.00	0.000E+00
5.00	0.0163	142795.50	7.003E-05
10.01	0.0311	142799.00	5.602E-05
15.00	0.0471	142805.00	1.401E-04
20.00	0.0620	142816.50	3.011E-04
25.00	0.0768	142828.00	4.622E-04
27.50	0.0846	142835.00	5.602E-04
30.00	0.0913	142842.50	6.653E-04
35.00	0.1054	142851.75	7.948E-04
40.00	0.1190	142870.50	1.057E-03
42.49	0.1260	142875.50	1.127E-03
45.00	0.1325	142885.25	1.264E-03
50.00	0.1454	142907.75	1.579E-03
52.49	0.1522	142912.50	1.646E-03
55.00	0.1581	142923.25	1.796E-03
59.99	0.1703	142943.75	2.083E-03
62.47	0.1765	142954.50	2.234E-03
64.99	0.1819	142965.00	2.381E-03
70.00	0.1932	142984.50	2.654E-03
72.05	0.1984	142995.00	2.801E-03

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	143058.75	0.000E+00
5.00	0.0165	143059.25	6.990E-05
9.98	0.0323	143064.50	8.039E-05
15.00	0.0478	143070.50	1.643E-04
17.50	0.0551	143075.50	2.342E-04
20.02	0.0632	143081.00	3.111E-04
25.02	0.0787	143093.50	4.858E-04
27.52	0.0864	143104.50	6.396E-04
30.00	0.0940	143110.75	7.270E-04
35.00	0.1085	143129.00	9.821E-04
40.00	0.1228	143146.00	1.220E-03
42.52	0.1299	143156.50	1.367E-03
45.00	0.1369	143166.50	1.506E-03
50.00	0.1504	143191.50	1.856E-03
52.51	0.1569	143203.00	2.017E-03
54.98	0.1635	143212.50	2.149E-03
60.00	0.1761	143237.50	2.499E-03
62.48	0.1825	143248.00	2.646E-03
65.00	0.1885	143260.00	2.814E-03
70.00	0.1998	143283.50	3.142E-03
72.07	0.2045	143291.50	3.254E-03

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	143364.50	0.000E+00
5.00	0.0183	143364.50	0.000E+00
10.00	0.0360	143371.50	9.765E-05
15.00	0.0541	143379.75	2.127E-04
17.51	0.0629	143385.00	2.860E-04
20.00	0.0716	143389.50	3.488E-04
24.98	0.0886	143403.50	5.441E-04
27.50	0.0973	143412.00	6.626E-04
30.00	0.1060	143420.00	7.743E-04
35.02	0.1223	143443.00	1.095E-03
40.00	0.1388	143460.50	1.339E-03
42.52	0.1465	143473.00	1.514E-03
45.01	0.1542	143485.50	1.688E-03
50.02	0.1693	143504.00	1.946E-03
52.51	0.1767	143514.00	2.086E-03
54.98	0.1767	143514.00	2.086E-03
60.00	0.1979	143550.50	2.595E-03
62.50	0.2050	143562.00	2.755E-03
65.02	0.2115	143573.50	2.916E-03
70.00	0.2250	143598.00	3.257E-03
72.07	0.2307	143611.50	3.446E-03

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	144020.00	0.000E+00
5.02	0.0225	144036.00	2.222E-04
9.98	0.0449	144085.00	9.027E-04
12.50	0.0560	144137.00	1.625E-03
15.00	0.0667	144212.25	2.670E-03
17.48	0.0841	144288.50	3.729E-03
20.02	0.0881	144362.50	4.756E-03
25.01	0.1113	144469.50	6.242E-03
27.52	0.1212	144515.50	6.881E-03
29.99	0.1322	144564.00	7.555E-03
35.00	0.1525	144633.00	8.513E-03
37.50	0.1626	144664.00	8.943E-03
40.00	0.1721	144690.00	9.304E-03
42.50	0.1820	144715.00	9.651E-03
44.99	0.1905	144741.00	1.001E-02
50.00	0.2088	144783.00	1.060E-02
55.00	0.2284	144821.50	1.113E-02
57.50	0.2371	144840.00	1.139E-02
59.99	0.2457	144853.50	1.157E-02
65.02	0.2634	144884.00	1.200E-02
70.01	0.2789	144908.50	1.234E-02
72.05	0.2851	144917.50	1.246E-02

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	143539.50	0.000E+00
5.00	0.0200	143540.50	1.393E-05
10.00	0.0390	143549.75	1.428E-04
15.01	0.0581	143556.50	2.369E-04
17.50	0.0676	143560.50	2.926E-04
20.02	0.0769	143567.50	3.901E-04
25.00	0.0954	143581.75	5.887E-04
27.50	0.1048	143591.00	7.176E-04
30.01	0.1135	143601.00	8.569E-04
35.02	0.1311	143621.00	1.136E-03
39.98	0.1482	143639.50	1.393E-03
42.49	0.1571	143650.00	1.540E-03
45.01	0.1653	143660.50	1.686E-03
50.02	0.1825	143680.75	1.968E-03
52.51	0.1912	143694.00	2.153E-03
55.00	0.1997	143703.25	2.282E-03
60.00	0.2163	143725.00	2.585E-03
62.52	0.2240	143739.50	2.787E-03
64.99	0.2317	143756.00	3.017E-03
70.00	0.2475	143784.50	3.414E-03
72.07	0.2540	143788.00	3.462E-03

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	143076.00	0.000E+00
5.00	0.0216	143057.00	-2.656E-04
7.50	0.0315	143026.50	-6.919E-04
10.01	0.0426	142984.25	-1.283E-03
15.01	0.0643	142879.00	-2.754E-03
20.00	0.0844	142744.25	-4.637E-03
53.76	0.2114	143683.00	8.485E-03
55.01	0.2159	143745.25	9.355E-03
59.99	0.2322	143911.00	1.167E-02
65.00	0.2489	144001.50	1.294E-02
70.00	0.2638	144071.50	1.392E-02
72.05	0.2692	144090.50	1.418E-02

C₃₃₃₃ (\vec{k}/\vec{c}), \vec{H}/\vec{a} :

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	260455.00	0.000E+00
4.99	0.0165	260442.25	-9.791E-05
7.51	0.0244	260418.50	-2.803E-04
10.00	0.0323	260388.50	-5.106E-04
14.99	0.0484	260306.25	-1.142E-03
17.50	0.0564	260256.50	-1.524E-03
19.99	0.0644	260197.50	-1.977E-03
24.98	0.0800	260067.75	-2.974E-03
27.50	0.0878	259998.75	-3.503E-03
29.99	0.0954	259925.50	-4.066E-03
35.02	0.1106	259773.00	-5.237E-03
37.50	0.1178	259698.75	-5.807E-03
39.98	0.1252	259622.75	-6.391E-03
45.01	0.1394	259469.50	-7.568E-03
47.50	0.1463	259396.75	-8.126E-03
49.99	0.1533	259325.00	-8.677E-03
54.98	0.1667	259188.25	-9.727E-03
57.53	0.1730	259121.75	-1.024E-02
60.01	0.1794	259063.75	-1.068E-02
65.00	0.1918	258951.75	-1.154E-02
67.51	0.1980	258899.50	-1.194E-02
69.98	0.2037	258853.00	-1.230E-02
72.04	0.2089	258816.50	-1.258E-02

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	260475.50	0.000E+00
5.00	0.0230	260432.25	-3.321E-04
7.51	0.0344	260375.50	-7.678E-04
10.00	0.0455	260299.75	-1.349E-03
15.00	0.0660	260098.75	-2.893E-03
17.50	0.0790	259978.25	-3.819E-03
20.03	0.0905	259849.50	-4.807E-03
22.51	0.1011	259720.00	-5.801E-03
25.00	0.1121	259586.25	-6.828E-03
27.52	0.1224	259449.50	-7.876E-03
29.97	0.1328	259318.75	-8.882E-03
35.02	0.1523	259059.25	-1.097E-02
37.50	0.1616	258944.25	-1.176E-02
40.01	0.1715	258835.25	-1.259E-02
45.01	0.1892	258645.00	-1.406E-02
47.48	0.1979	258563.75	-1.468E-02
50.03	0.2066	258484.25	-1.529E-02
55.00	0.2225	258368.00	-1.618E-02
60.00	0.2379	258280.75	-1.685E-02
65.02	0.2523	258215.25	-1.735E-02
70.00	0.2660	258176.25	-1.765E-02
72.05	0.2720	258164.50	-1.774E-02

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	260476.25	0.000E+00
5.00	0.0182	260448.00	-2.169E-04
7.50	0.0269	260420.00	-4.319E-04
10.01	0.0360	260371.50	-8.043E-04
15.01	0.0536	260247.75	-1.754E-03
17.50	0.0625	260170.00	-2.351E-03
20.02	0.0713	260089.25	-2.971E-03
25.01	0.0884	259903.75	-4.396E-03
27.50	0.0971	259807.50	-5.135E-03
30.00	0.1058	259709.25	-5.889E-03
35.02	0.1227	259513.25	-7.394E-03
37.51	0.1316	259417.50	-8.129E-03
40.00	0.1399	259324.25	-8.845E-03
45.00	0.1559	259146.50	-1.021E-02
47.50	0.1635	259061.50	-1.086E-02
50.00	0.1711	258985.50	-1.145E-02
55.00	0.1859	258842.75	-1.254E-02
57.52	0.1932	258778.75	-1.303E-02
60.00	0.2002	258719.00	-1.349E-02
65.02	0.2137	258614.50	-1.429E-02
67.50	0.2202	258573.25	-1.461E-02
69.98	0.2270	258531.75	-1.493E-02
72.05	0.2319	258503.75	-1.515E-02

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	260384.75	0.000E+00
2.50	0.0140	260364.75	-1.536E-04
5.00	0.0279	260295.00	-6.894E-04
7.50	0.0416	260191.50	-1.484E-03
10.02	0.0557	260052.25	-2.554E-03
12.50	0.0695	259888.50	-3.812E-03
15.00	0.0828	259704.50	-5.225E-03
17.51	0.0963	259505.00	-6.757E-03
20.00	0.1094	259304.50	-8.297E-03
22.50	0.1226	259105.00	-9.830E-03
25.01	0.1354	258917.25	-1.127E-02
27.50	0.1474	258743.50	-1.261E-02
30.00	0.1596	258576.00	-1.389E-02
32.51	0.1714	258431.25	-1.500E-02
35.00	0.1825	258304.75	-1.598E-02
37.51	0.1936	258190.00	-1.686E-02
40.01	0.2038	258101.50	-1.754E-02
42.50	0.2143	258021.75	-1.815E-02
45.00	0.2241	257961.75	-1.861E-02
50.00	0.2434	257884.75	-1.920E-02
54.98	0.2606	257815.00	-1.951E-02
57.52	0.2691	257838.75	-1.956E-02
60.00	0.2768	257810.25	-1.954E-02
62.50	0.2849	257852.50	-1.945E-02
65.00	0.2923	257867.75	-1.933E-02
67.50	0.2995	257886.50	-1.919E-02
70.00	0.3069	257899.75	-1.909E-02
72.05	0.3120	257923.25	-1.891E-02

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	260194.25	0.000E+00
2.50	0.0192	260144.00	-3.862E-04
5.00	0.0381	259990.75	-1.564E-03
6.24	0.0474	259879.75	-2.417E-03
7.49	0.0568	259757.50	-3.357E-03
8.56	0.0650	259634.25	-4.304E-03
9.98	0.0750	259462.25	-5.627E-03
11.09	0.0830	259324.75	-6.683E-03
12.52	0.0932	259138.75	-8.113E-03
13.70	0.1015	258993.50	-9.230E-03
15.01	0.1107	258823.75	-1.053E-02
16.28	0.1191	258661.75	-1.178E-02
17.50	0.1277	258518.75	-1.288E-02
19.99	0.1442	258241.25	-1.501E-02
22.50	0.1601	258009.25	-1.680E-02
23.54	0.1664	257925.75	-1.744E-02
25.01	0.1751	257822.75	-1.823E-02
27.49	0.1899	257672.50	-1.938E-02
30.00	0.2045	257559.25	-2.025E-02
31.00	0.2097	257524.25	-2.052E-02
32.50	0.2177	257480.75	-2.086E-02
35.00	0.2302	257430.25	-2.125E-02
37.51	0.2426	257405.50	-2.144E-02
38.38	0.2472	257400.00	-2.148E-02
40.00	0.2548	257396.75	-2.159E-02
41.13	0.2602	257400.50	-2.147E-02
42.50	0.2669	257404.75	-2.144E-02
45.00	0.2771	257426.00	-2.128E-02
47.50	0.2873	257458.50	-2.103E-02
50.00	0.2972	257498.50	-2.072E-02
52.50	0.3069	257544.25	-2.037E-02
55.01	0.3154	257597.00	-1.996E-02
57.53	0.3237	257652.25	-1.954E-02
60.00	0.3315	257713.75	-1.907E-02
62.50	0.3387	257777.00	-1.858E-02
65.00	0.3461	257843.75	-1.807E-02
67.51	0.3531	257911.00	-1.755E-02
70.00	0.3600	257978.50	-1.703E-02
72.07	0.3655	258034.00	-1.660E-02

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	259904.25	0.000E+00
2.50	0.0265	259750.75	-1.181E-03
3.41	0.0351	259627.75	-2.128E-03
5.02	0.0513	259330.25	-4.417E-03
6.17	0.0631	259081.25	-6.333E-03
7.50	0.0752	258778.00	-8.667E-03
8.36	0.0838	258585.00	-1.015E-02
10.01	0.1001	258218.00	-1.298E-02
10.97	0.1076	258019.75	-1.450E-02
12.50	0.1216	257735.50	-1.669E-02
13.71	0.1329	257744.50	-1.662E-02
15.01	0.1444	257362.25	-1.956E-02
17.48	0.1645	257097.50	-2.160E-02
20.00	0.1846	256925.00	-2.293E-02
22.47	0.2034	256832.50	-2.364E-02
23.45	0.2112	256817.50	-2.375E-02
24.97	0.2207	256804.50	-2.385E-02
26.23	0.2296	256808.50	-2.382E-02
27.50	0.2375	256820.00	-2.373E-02
28.79	0.2461	256845.00	-2.354E-02
30.01	0.2541	256870.25	-2.335E-02
32.50	0.2683	256940.50	-2.281E-02
35.02	0.2822	257026.75	-2.214E-02
37.50	0.2964	257128.75	-2.136E-02
39.98	0.3097	257236.75	-2.053E-02
42.49	0.3211	257345.00	-1.969E-02
45.00	0.3314	257460.00	-1.881E-02
47.48	0.3416	257571.75	-1.795E-02
50.00	0.3513	257684.50	-1.708E-02
52.50	0.3604	257799.75	-1.619E-02
54.98	0.3702	257905.75	-1.538E-02
57.50	0.3773	258018.00	-1.451E-02
60.00	0.3853	258120.75	-1.372E-02
62.50	0.3918	258221.25	-1.295E-02
65.03	0.3989	258326.75	-1.214E-02
67.49	0.4052	258425.00	-1.138E-02
70.00	0.4122	258518.75	-1.066E-02
72.07	0.4165	258596.00	-1.007E-02

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	259118.25	0.000E+00
1.12	0.0217	258946.50	-1.326E-03
1.91	0.0353	258641.25	-3.682E-03
2.50	0.0468	258354.25	-5.897E-03
3.14	0.0584	257983.00	-8.762E-03
3.98	0.0717	257517.25	-1.236E-02
5.00	0.0900	256976.75	-1.653E-02
5.94	0.1045	256587.75	-1.953E-02
7.10	0.1232	256209.00	-2.245E-02
7.60	0.1302	256093.00	-2.335E-02
8.88	0.1440	255872.50	-2.505E-02
10.00	0.1648	255771.50	-2.583E-02
11.12	0.1792	255729.25	-2.616E-02
12.50	0.1964	255737.75	-2.609E-02
13.71	0.2101	255780.50	-2.576E-02
15.00	0.2257	255854.75	-2.519E-02
17.51	0.2504	256049.75	-2.368E-02
20.02	0.2737	256271.25	-2.197E-02
22.51	0.2926	256492.50	-2.027E-02
24.98	0.3098	256720.25	-1.851E-02
27.50	0.3261	256944.00	-1.678E-02
30.00	0.3418	257157.25	-1.514E-02
32.51	0.3544	257361.75	-1.356E-02
35.00	0.3678	257556.25	-1.206E-02
37.51	0.3790	257743.25	-1.061E-02
40.00	0.3896	257916.75	-9.274E-03
42.52	0.3988	258089.00	-7.944E-03
45.01	0.4084	258248.25	-6.715E-03
47.50	0.4167	258398.50	-5.555E-03
50.00	0.4246	258540.75	-4.457E-03
52.51	0.4317	258683.00	-3.359E-03
55.00	0.4387	258810.25	-2.377E-03
57.52	0.4451	258933.25	-1.428E-03
60.00	0.4517	259053.75	-4.978E-04
62.48	0.4569	259166.25	3.705E-04
65.02	0.4626	259279.25	1.243E-03
67.49	0.4676	259383.25	2.045E-03
69.98	0.4731	259489.00	2.862E-03
72.05	0.4771	259568.50	3.475E-03

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	261205.20	0.000E+00
0.40	0.0114	261131.50	-5.643E-04
0.75	0.0209	260900.00	-2.337E-03
1.10	0.0308	260572.00	-4.848E-03
1.51	0.0403	260108.75	-8.395E-03
2.08	0.0530	259417.00	-1.369E-02
2.50	0.0634	258991.50	-1.695E-02
3.00	0.0756	258579.75	-2.010E-02
3.95	0.0965	258050.00	-2.416E-02
5.00	0.1201	257840.50	-2.570E-02
5.50	0.1252	257828.25	-2.586E-02
5.90	0.1376	257833.50	-2.582E-02
6.66	0.1525	257899.00	-2.531E-02
7.50	0.1684	258005.00	-2.450E-02
10.01	0.2106	258436.00	-2.120E-02
12.50	0.2459	258879.25	-1.781E-02
14.99	0.2765	259298.00	-1.460E-02
17.52	0.3028	259678.25	-1.169E-02
19.99	0.3250	260027.25	-9.017E-03
22.50	0.3435	260331.00	-6.694E-03
24.97	0.3598	260615.75	-4.513E-03
27.50	0.3742	260880.25	-2.488E-03
30.00	0.3873	261121.75	-6.390E-04
32.51	0.3997	261344.75	1.069E-03
35.00	0.4113	261550.50	2.644E-03
37.49	0.4211	261746.75	4.147E-03
40.01	0.4309	261936.00	5.596E-03
42.52	0.4386	262109.50	6.924E-03
45.00	0.4471	262272.75	8.174E-03
47.51	0.4543	262427.75	9.361E-03
50.02	0.4609	262576.25	1.050E-02
52.53	0.4667	262717.25	1.158E-02
55.00	0.4731	262848.50	1.258E-02
57.52	0.4783	262980.75	1.360E-02
59.99	0.4843	262086.00	6.744E-03
62.51	0.4882	262204.50	7.651E-03
65.03	0.4940	262322.00	8.551E-03
67.50	0.4979	262420.75	9.307E-03
69.98	0.5024	262524.75	1.010E-02
72.05	0.5045	262603.25	1.070E-02

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	257853.75	0.000E+00
0.44	0.0207	257712.25	-8.648E-04
3.73	0.1349	258128.75	2.133E-03
5.00	0.1701	258801.00	7.813E-03
7.50	0.2249	259871.00	1.565E-02
9.98	0.2671	260591.50	2.123E-02
12.49	0.3064	261111.25	2.550E-02
15.01	0.3275	261611.50	2.915E-02
17.48	0.3493	262008.50	3.223E-02
20.02	0.3673	262363.25	3.498E-02
22.51	0.3820	262671.00	3.736E-02
25.00	0.3954	262946.00	3.950E-02
27.52	0.4083	263205.25	4.151E-02
30.01	0.4196	263442.75	4.335E-02
32.52	0.4325	263661.50	4.505E-02
35.00	0.4400	263866.25	4.663E-02
37.53	0.4488	264063.75	4.817E-02
40.00	0.4572	264238.00	4.952E-02
42.50	0.4645	264409.75	5.085E-02
45.00	0.4721	264563.00	5.204E-02
47.50	0.4789	264713.00	5.320E-02
50.02	0.4843	264855.25	5.431E-02
52.51	0.4898	264991.25	5.536E-02
55.00	0.4947	265114.50	5.632E-02
57.50	0.4999	265234.25	5.725E-02
60.00	0.5054	265349.25	5.814E-02
62.50	0.5096	265456.75	5.897E-02
65.00	0.5149	265561.50	5.978E-02
67.51	0.5184	265663.25	6.057E-02
70.00	0.5221	265760.50	6.133E-02
72.07	0.5252	265839.75	6.194E-02

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	261640.25	0.000E+00
1.38	0.1477	261684.25	3.363E-04
2.52	0.2527	261756.25	8.867E-04
3.78	0.3210	261831.50	1.462E-03
4.40	0.3350	262020.25	2.905E-03
5.00	0.3457	262245.50	4.627E-03
5.81	0.3586	262434.25	6.452E-03
7.49	0.3800	262871.25	9.410E-03
8.71	0.3621	263095.25	1.112E-02
10.00	0.4025	263310.75	1.277E-02
12.52	0.4214	263690.25	1.567E-02
14.99	0.4363	263997.75	1.802E-02
17.48	0.4513	264285.25	2.022E-02
20.02	0.4636	264546.50	2.222E-02
22.50	0.4742	264772.00	2.394E-02
25.00	0.4845	264986.75	2.558E-02
27.50	0.4934	265187.75	2.712E-02
29.99	0.5014	265365.75	2.848E-02
32.48	0.5091	265533.25	2.976E-02
35.02	0.5158	265702.00	3.105E-02
37.50	0.5221	265851.25	3.219E-02
39.98	0.5284	265989.00	3.324E-02
42.50	0.5336	266120.00	3.424E-02
45.00	0.5389	266251.25	3.525E-02
50.00	0.5478	266489.50	3.700E-02
55.00	0.5560	266692.50	3.862E-02
60.00	0.5634	266889.00	4.012E-02
64.99	0.5699	267061.75	4.144E-02
70.01	0.5763	267227.50	4.271E-02
72.08	0.5778	267293.00	4.321E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	258027.75	0.000E+00
1.37	0.0513	257453.75	-4.449E-03
2.06	0.0744	257057.00	-7.524E-04
2.74	0.0995	256718.75	-1.015E-02
3.46	0.1228	256516.50	-1.171E-02
3.92	0.1375	256859.50	-9.055E-03
4.41	0.1526	257154.00	-6.773E-03
5.00	0.1685	257435.50	-4.591E-03
6.18	0.1987	257873.75	-1.104E-03
7.64	0.2331	258281.25	1.965E-03
10.00	0.2773	258819.75	6.139E-03
12.52	0.3138	259292.00	9.709E-03
15.00	0.3447	259670.50	1.273E-02
17.52	0.3677	260006.50	1.534E-02
19.99	0.3901	260292.00	1.755E-02
22.50	0.4066	260559.75	1.963E-02
25.01	0.4207	260806.00	2.153E-02
27.53	0.4337	261031.25	2.328E-02
30.01	0.4464	261227.75	2.480E-02
32.50	0.4566	261419.25	2.629E-02
35.00	0.4664	261600.75	2.769E-02
37.50	0.4764	261769.50	2.900E-02
40.01	0.4838	261926.00	3.022E-02
42.50	0.4903	262076.25	3.138E-02
44.99	0.4979	262217.50	3.248E-02
47.50	0.5037	262338.50	3.341E-02
50.02	0.5093	262465.50	3.430E-02
52.49	0.5147	262578.00	3.527E-02
55.00	0.5197	262693.00	3.616E-02
57.53	0.5240	262798.75	3.698E-02
59.97	0.5289	262893.75	3.772E-02
62.50	0.5326	262996.00	3.851E-02
67.50	0.5404	263130.00	3.904E-02
70.00	0.5434	263260.50	4.056E-02
72.05	0.5451	263335.25	4.114E-02

TEMPERATURA = 215.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	263299.00	0.000E+00
2.51	0.2720	263352.75	4.083E-04
4.10	0.3753	263502.50	1.546E-03
4.99	0.3956	263724.50	3.270E-03
6.58	0.4189	264072.75	5.877E-03
7.50	0.4282	264223.00	7.019E-03
9.97	0.4498	264573.75	9.683E-03
12.52	0.4662	264870.75	1.194E-02
15.01	0.4795	265134.00	1.394E-02
17.51	0.4900	265360.50	1.566E-02
19.99	0.5007	265574.75	1.729E-02
22.50	0.5093	265775.25	1.881E-02
25.01	0.5181	265953.50	2.016E-02
27.49	0.5262	266108.75	2.134E-02
30.01	0.5335	266232.00	2.266E-02
32.50	0.5398	266431.00	2.379E-02
35.02	0.5460	266567.00	2.482E-02
37.50	0.5506	266701.50	2.585E-02
39.97	0.5558	266817.50	2.673E-02
44.99	0.5653	267059.00	2.856E-02
50.02	0.5748	267268.75	3.015E-02
55.00	0.5825	267458.75	3.160E-02
60.00	0.5898	267621.75	3.294E-02
65.00	0.5960	267742.50	3.406E-02
70.00	0.6018	267924.25	3.513E-02
72.08	0.6033	267983.00	3.558E-02

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	263201.00	0.000E+00
2.28	0.2576	263229.75	2.185E-04
5.00	0.4506	263452.00	1.907E-03
6.27	0.4722	263553.00	3.663E-03
7.51	0.4840	263853.50	4.958E-03
8.99	0.4947	264021.75	6.237E-03
10.00	0.5001	264127.00	7.036E-03
12.53	0.5125	264365.00	8.845E-03
15.01	0.5234	264573.75	1.043E-02
17.48	0.5321	264761.00	1.135E-02
20.00	0.5402	264937.00	1.195E-02
22.51	0.5473	265108.00	1.447E-02
25.01	0.5540	265258.00	1.563E-02
27.53	0.5599	265405.25	1.675E-02
30.00	0.5657	265535.25	1.774E-02
32.50	0.5711	265668.00	1.875E-02
35.02	0.5749	265787.50	1.965E-02
37.51	0.5805	265897.50	2.049E-02
40.01	0.5847	265997.75	2.125E-02
45.01	0.5917	266201.75	2.280E-02
49.99	0.5998	266384.00	2.419E-02
55.00	0.6052	266549.25	2.544E-02
60.00	0.6105	266695.75	2.656E-02
65.00	0.6158	266833.50	2.760E-02
69.98	0.6211	266959.00	2.856E-02
72.08	0.6244	267008.00	2.893E-02

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	265747.25	0.000E+00
2.52	0.2925	265750.75	1.016E-04
5.02	0.5024	265811.25	7.074E-04
6.79	0.5373	266031.75	2.141E-03
7.49	0.5449	266087.25	2.559E-03
10.00	0.5622	266276.25	3.981E-03
12.52	0.5721	266431.25	5.148E-03
15.00	0.5807	266570.75	6.198E-03
17.50	0.5866	266706.00	7.216E-03
20.02	0.5938	266831.00	8.156E-03
22.51	0.5989	266946.75	9.027E-03
25.00	0.6049	267056.50	9.853E-03
30.00	0.6143	267256.50	1.136E-02
35.02	0.6229	267431.00	1.267E-02
40.04	0.6303	267542.00	1.388E-02
45.03	0.6364	267737.00	1.497E-02
50.02	0.6430	267863.50	1.593E-02
55.00	0.6487	267976.50	1.678E-02
60.03	0.6532	268092.00	1.765E-02
65.03	0.6581	268192.00	1.840E-02
69.98	0.6626	268283.50	1.909E-02
72.07	0.6639	268319.50	1.936E-02

TEMPERATURA = 190.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	267688.25	0.000E+00
2.50	0.2860	267689.50	9.339E-06
5.02	0.5230	267734.50	3.456E-04
7.50	0.6068	267890.25	1.509E-03
10.01	0.6258	268016.50	2.452E-03
12.49	0.6362	268131.25	3.310E-03
15.00	0.6426	268229.25	4.042E-03
17.50	0.6481	268323.00	4.742E-03
20.02	0.6528	268407.50	5.374E-03
22.50	0.6568	268484.00	5.945E-03
25.02	0.6605	268564.25	6.545E-03
27.49	0.6641	268638.00	7.096E-03
32.50	0.6697	268772.00	8.097E-03
37.51	0.6752	268895.00	9.016E-03
42.52	0.6804	269004.75	9.836E-03
47.50	0.6844	269107.00	1.060E-02
52.50	0.6885	269200.50	1.130E-02
57.50	0.6923	269279.50	1.189E-02
62.48	0.6948	269358.75	1.248E-02
67.50	0.6976	269433.00	1.304E-02
72.02	0.7009	269491.50	1.347E-02

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	269270.75	0.000E+00
2.52	0.2927	269272.75	1.485E-05
5.00	0.5370	269298.75	2.080E-04
7.50	0.6447	269408.00	1.019E-03
10.00	0.6641	269500.25	1.705E-03
12.49	0.6744	269576.75	2.273E-03
15.00	0.6829	269646.00	2.787E-03
17.50	0.6872	269715.00	3.300E-03
20.00	0.6928	269775.25	3.747E-03
22.53	0.6954	269832.50	4.172E-03
27.49	0.7024	269941.00	4.976E-03
32.50	0.7071	270040.75	5.719E-03
37.51	0.7111	270124.75	6.343E-03
42.53	0.7150	270209.75	6.974E-03
47.51	0.7192	270266.25	7.394E-03
52.51	0.7228	270336.25	7.914E-03
57.50	0.7240	270402.50	8.406E-03
60.00	0.7259	270423.00	8.558E-03
65.02	0.7287	270473.75	8.935E-03
69.98	0.7320	270523.75	9.307E-03
72.05	0.7324	270542.50	9.446E-03

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	270537.25	0.000E+00
2.50	0.2806	270535.00	-1.663E-05
5.02	0.5310	270554.00	1.238E-04
7.50	0.6598	270658.00	8.927E-04
10.00	0.6868	270735.75	1.457E-03
15.00	0.7054	270854.25	2.343E-03
20.00	0.7145	270961.75	3.138E-03
24.98	0.7219	271056.50	3.839E-03
30.01	0.7272	271129.50	4.378E-03
35.02	0.7317	271261.75	4.912E-03
40.01	0.7345	271260.00	5.343E-03
45.00	0.7386	271307.75	5.696E-03
50.02	0.7419	271345.75	5.977E-03
55.00	0.7439	271383.00	6.252E-03
60.00	0.7476	271409.00	6.445E-03
65.00	0.7500	271443.00	6.636E-03
69.98	0.7527	271476.00	6.940E-03
72.67	0.7537	271488.25	7.030E-03

TEMPERATURA = 140.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	269791.00	0.000E+00
5.00	0.5429	269796.75	4.263E-05
10.01	0.7731	269894.25	7.654E-04
15.03	0.7973	269929.00	1.023E-03
20.00	0.8069	269969.00	1.320E-03
24.98	0.8106	270005.00	1.586E-03
30.01	0.8151	270028.00	1.757E-03
35.00	0.8175	270051.00	1.927E-03
40.00	0.8211	270071.00	2.076E-03
45.03	0.8233	270095.00	2.254E-03
50.02	0.8245	270115.00	2.402E-03
55.00	0.8265	270126.50	2.487E-03
60.01	0.8277	270152.00	2.676E-03
65.00	0.8290	270170.50	2.813E-03
70.00	0.8302	270181.00	2.891E-03
72.07	0.8310	270181.50	2.895E-03

TEMPERATURA = 120.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	271004.00	0.000E+00
5.00	0.5490	271012.00	5.904E-05
10.00	0.8144	271095.00	6.716E-04
15.00	0.8458	271116.00	8.266E-04
20.00	0.8546	271133.00	9.520E-04
25.02	0.8576	271152.00	1.092E-03
30.00	0.8605	271164.50	1.184E-03
35.02	0.8621	271179.50	1.295E-03
39.98	0.8650	271186.50	1.362E-03
45.03	0.8662	271202.50	1.465E-03
50.02	0.8672	271207.50	1.502E-03
55.00	0.8685	271223.00	1.616E-03
60.01	0.8695	271228.00	1.653E-03
65.00	0.8703	271226.00	1.638E-03
70.04	0.8711	271231.50	1.679E-03
72.08	0.8715	271236.00	1.712E-03

TEMPERATURA = 100.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	271963.00	0.000E+00
5.02	0.5527	271964.50	1.103E-05
10.04	0.8468	272015.50	6.067E-04
15.01	0.8840	272052.50	6.582E-04
20.02	0.8959	272065.50	7.538E-04
25.01	0.8987	272073.00	8.089E-04
30.03	0.9004	272065.00	8.972E-04
35.00	0.9020	272070.00	9.340E-04
40.01	0.9032	272094.50	9.670E-04
45.03	0.9053	272097.50	9.891E-04
54.98	0.9073	272097.00	9.854E-04
60.03	0.9081	272098.50	9.965E-04
65.02	0.9098	272107.00	1.059E-03
70.01	0.9106	272108.00	1.066E-03
72.05	0.9114	272108.00	1.066E-03

TEMPERATURA = 150.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	269006.00	0.000E+00
5.00	0.5419	269014.50	6.320E-05
10.00	0.7522	269126.50	8.959E-04
15.00	0.7734	269181.00	1.301E-03
19.99	0.7820	269232.00	1.680E-03
25.00	0.7865	269284.50	2.071E-03
30.01	0.7910	269321.00	2.342E-03
35.02	0.7934	269356.00	2.602E-03
40.00	0.7959	269386.00	2.825E-03
44.99	0.7979	269422.00	3.093E-03
50.03	0.8003	269443.00	3.249E-03
54.98	0.8014	269466.50	3.424E-03
60.00	0.8040	269504.00	3.703E-03
65.18	0.8054	269521.50	3.833E-03
70.01	0.8061	269532.00	3.911E-03
72.08	0.8069	269536.50	3.944E-03

TEMPERATURA = 80.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	272638.50	0.000E+00
5.09	0.5450	272636.00	-1.834E-05
10.00	0.8781	272716.50	5.722E-04
14.99	0.9235	272724.50	6.309E-04
20.00	0.9386	272735.00	7.079E-04
25.04	0.9425	272741.50	7.556E-04
30.00	0.9442	272744.00	7.739E-04
40.01	0.9472	272735.50	7.116E-04
50.00	0.9493	272734.00	7.006E-04
60.00	0.9511	272727.50	6.529E-04
70.01	0.9521	272725.00	6.345E-04
72.05	0.9523	272725.00	6.345E-04

TEMPERATURA = 60.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	273195.25	0.000E+00
5.00	0.5565	273192.00	-2.379E-05
10.01	0.8927	273260.50	4.777E-04
15.00	0.9399	273274.50	5.802E-04
20.00	0.9538	273270.50	5.509E-04
30.03	0.9587	273269.50	5.436E-04
39.98	0.9595	273265.50	5.143E-04
50.02	0.9615	273266.00	5.179E-04
60.00	0.9615	273246.50	3.752E-04
70.00	0.9615	273241.50	3.386E-04
72.05	0.9615	273240.00	3.276E-04

TEMPERATURA = 40.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	273581.75	0.000E+00
5.02	0.5657	273573.00	-6.397E-05
9.98	0.9177	273637.50	4.076E-04
15.01	0.9685	273654.00	5.282E-04
20.00	0.9844	273653.50	5.245E-04
25.01	0.9885	273653.50	5.245E-04
30.01	0.9910	273659.00	5.647E-04
35.02	0.9910	273654.00	5.282E-04
40.00	0.9910	273648.00	4.843E-04
45.03	0.9910	273644.50	4.587E-04
50.00	0.9910	273641.75	4.386E-04
55.00	0.9910	273644.00	4.551E-04
60.01	0.9910	273641.50	4.368E-04
65.02	0.9910	273645.50	4.660E-04
70.01	0.9910	273645.50	4.660E-04
72.05	0.9910	273645.50	4.660E-04

TEMPERATURA = 20.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	273877.25	0.000E+00
2.50	0.2956	273884.50	5.294E-05
5.00	0.5585	273921.00	3.175E-04
9.98	0.9238	273857.00	-1.479E-04
14.97	0.9743	273864.50	-9.311E-05
20.00	0.9918	273860.50	-1.223E-04
25.00	0.9984	273864.00	-9.676E-05
35.00	0.9982	273860.00	-1.260E-04
40.00	0.9988	273864.50	-9.311E-05
45.00	0.9988	273863.50	-1.004E-04
50.02	0.9988	273865.50	-8.580E-05
60.00	0.9988	273875.00	-1.643E-05
65.00	0.9988	273870.75	-4.747E-05
70.00	0.9988	273864.00	-9.676E-05
72.05	0.9988	273861.00	-1.187E-04

C₃₃₃₃ (K//C), H//B:

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	220227.50	0.000E+00
5.50	0.0174	220207.00	-1.862E-04
10.96	0.0348	220153.00	-6.766E-04
16.45	0.0515	220067.00	-1.458E-03
22.02	0.0695	219946.00	-2.556E-03
27.45	0.0863	219814.00	-3.755E-03
32.89	0.1027	219665.00	-5.108E-03
38.38	0.1189	219529.00	-6.343E-03
43.93	0.1346	219379.00	-7.706E-03
49.36	0.1491	219244.50	-8.927E-03
54.84	0.1633	219108.50	-1.016E-02
60.37	0.1769	218989.00	-1.125E-02
65.83	0.1842	218881.00	-1.223E-02
68.58	0.1954	218840.00	-1.260E-02
70.65	0.2003	218804.00	-1.293E-02

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	220223.00	0.000E+00
5.51	0.0206	220189.00	-3.088E-04
11.02	0.0412	220107.00	-1.053E-03
16.45	0.0613	219972.00	-2.280E-03
22.07	0.0816	219894.00	-3.805E-03
27.45	0.1007	219616.00	-5.513E-03
32.93	0.1196	219416.50	-7.324E-03
38.39	0.1376	219225.50	-9.059E-03
43.88	0.1548	219044.75	-1.070E-02
49.40	0.1714	218864.50	-1.216E-02
54.84	0.1864	218752.50	-1.335E-02
60.36	0.2017	218646.00	-1.432E-02
65.88	0.2158	218562.00	-1.508E-02
68.58	0.2226	218526.00	-1.541E-02
70.65	0.2278	218502.50	-1.563E-02

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	220181.00	0.000E+00
5.53	0.0241	220128.50	-4.769E-04
11.01	0.0489	219983.50	-1.794E-03
16.48	0.0726	219768.50	-3.747E-03
22.03	0.0963	219506.50	-6.127E-03
27.48	0.1186	219240.50	-8.543E-03
32.91	0.1399	218991.50	-1.080E-02
38.46	0.1617	218764.50	-1.287E-02
43.92	0.1820	218583.00	-1.452E-02
49.41	0.2005	218440.50	-1.581E-02
54.90	0.2179	218332.00	-1.680E-02
60.37	0.2342	218258.50	-1.746E-02
65.88	0.2496	218215.50	-1.785E-02
68.67	0.2570	218200.00	-1.799E-02
70.64	0.2627	218195.00	-1.804E-02

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	220031.00	0.000E+00
5.59	0.0288	219973.00	-9.815E-04
9.79	0.0518	219775.00	-2.781E-03
11.06	0.0585	219700.00	-3.462E-03
13.71	0.0726	219520.00	-5.098E-03
16.47	0.0870	219325.00	-6.870E-03
17.91	0.0941	219218.00	-7.843E-03
19.20	0.1007	219126.50	-8.674E-03
20.70	0.1086	219022.75	-9.617E-03
21.94	0.1154	218936.50	-1.040E-02
23.30	0.1221	218841.50	-1.126E-02
24.72	0.1289	218751.50	-1.208E-02
26.17	0.1363	218657.50	-1.294E-02
27.50	0.1422	218582.00	-1.362E-02
28.89	0.1491	218501.00	-1.436E-02
30.34	0.1555	218431.50	-1.499E-02
32.91	0.1671	218312.50	-1.607E-02
35.69	0.1802	218207.00	-1.703E-02
38.47	0.1921	218121.00	-1.781E-02
41.23	0.2036	218049.00	-1.847E-02
43.93	0.2140	218001.00	-1.899E-02
49.44	0.2336	217936.00	-1.949E-02
55.00	0.2521	217918.00	-1.966E-02
60.40	0.2686	217931.00	-1.954E-02
63.25	0.2772	217949.00	-1.937E-02
65.88	0.2846	217968.50	-1.920E-02
68.65	0.2926	217993.00	-1.897E-02
70.65	0.2991	218014.00	-1.878E-02

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	220370.50	0.000E+00
2.80	0.0184	220304.00	-6.035E-04
5.51	0.0364	220124.00	-2.237E-03
6.86	0.0452	220003.50	-3.331E-03
8.24	0.0538	219866.00	-4.579E-03
9.63	0.0630	219709.25	-6.001E-03
11.00	0.0720	219533.50	-7.596E-03
12.38	0.0808	219380.50	-8.985E-03
13.75	0.0898	219225.00	-1.040E-02
15.16	0.0984	219065.50	-1.184E-02
16.47	0.1072	218930.50	-1.307E-02
17.91	0.1162	218786.50	-1.438E-02
19.21	0.1242	218662.00	-1.551E-02
20.64	0.1334	218539.50	-1.662E-02
21.98	0.1412	218437.50	-1.754E-02
23.47	0.1502	218334.75	-1.848E-02
24.68	0.1567	218266.50	-1.910E-02
27.44	0.1725	218135.50	-2.028E-02
30.18	0.1882	218042.50	-2.113E-02
31.58	0.1948	218011.00	-2.141E-02
32.98	0.2013	217988.50	-2.162E-02
34.28	0.2072	217975.00	-2.174E-02
35.68	0.2144	217964.50	-2.184E-02
37.07	0.2216	217959.50	-2.188E-02
38.45	0.2275	217960.00	-2.188E-02
39.82	0.2334	217963.50	-2.185E-02
41.17	0.2394	217973.00	-2.176E-02
43.94	0.2512	217999.00	-2.152E-02
46.65	0.2625	218037.50	-2.117E-02
49.39	0.2727	218086.00	-2.073E-02
52.23	0.2829	218142.00	-2.023E-02
55.00	0.2938	218203.00	-1.967E-02
57.82	0.3028	218267.50	-1.909E-02
60.51	0.3112	218331.00	-1.851E-02
63.21	0.3192	218395.00	-1.793E-02
65.95	0.3269	218462.50	-1.732E-02
68.62	0.3335	218528.00	-1.672E-02
70.65	0.3392	218580.50	-1.625E-02

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	220069.50	0.000E+00
2.78	0.0331	219870.00	-1.813E-03
4.17	0.0499	219653.00	-3.785E-03
5.47	0.0642	219398.00	-6.103E-03
6.90	0.0814	219096.25	-8.845E-03
8.27	0.0961	218800.25	-1.153E-02
9.63	0.1107	218524.50	-1.404E-02
11.04	0.1254	218258.50	-1.646E-02
12.37	0.1393	218043.75	-1.841E-02
13.74	0.1526	217853.50	-2.014E-02
16.49	0.1786	217584.50	-2.258E-02
19.29	0.2019	217442.50	-2.397E-02
20.58	0.2115	217400.00	-2.426E-02
21.99	0.2228	217374.00	-2.450E-02
23.38	0.2332	217371.50	-2.452E-02
24.73	0.2428	217381.50	-2.443E-02
27.42	0.2602	217431.00	-2.398E-02
30.25	0.2784	217514.00	-2.322E-02
33.02	0.2949	217611.00	-2.234E-02
35.73	0.3085	217720.50	-2.135E-02
38.45	0.3214	217833.50	-2.032E-02
43.93	0.3449	218068.50	-1.819E-02
49.40	0.3650	218302.75	-1.606E-02
54.97	0.3830	218529.00	-1.400E-02
60.43	0.3985	218741.50	-1.207E-02
65.85	0.4120	218940.50	-1.026E-02
68.58	0.4190	219034.50	-9.406E-03
70.65	0.4231	219107.50	-8.743E-03

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	219615.00	0.000E+00
1.36	0.0266	219251.00	-3.315E-03
2.04	0.0417	218867.75	-6.805E-03
2.77	0.0564	218409.00	-1.098E-02
4.13	0.0813	217610.50	-1.825E-02
5.51	0.1084	217118.50	-2.274E-02
6.32	0.1579	216677.00	-2.676E-02
11.09	0.2127	216734.50	-2.623E-02
13.77	0.2323	216953.00	-2.424E-02
16.49	0.2627	217225.50	-2.176E-02
19.32	0.2892	217499.00	-1.927E-02
21.95	0.3090	217745.00	-1.703E-02
24.68	0.3277	217991.50	-1.478E-02
27.42	0.3451	218217.50	-1.273E-02
32.98	0.3724	218636.50	-8.911E-03
38.49	0.3950	218999.50	-5.605E-03
44.01	0.4148	219320.00	-2.687E-03
49.40	0.4297	219598.50	-1.503E-04
54.93	0.4447	219860.00	2.231E-03
60.37	0.4572	220092.25	4.346E-03
65.88	0.4684	220302.50	6.261E-03
68.61	0.4744	220405.00	7.194E-03
70.68	0.4782	220474.50	7.827E-03

TEMPERATURA = 234.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	196702.50	0.000E+00
1.17	0.0393	195672.00	-1.048E-02
2.89	0.0916	191000.00	-5.708E-02
5.58	0.1596	192935.50	-3.830E-02
8.36	0.2160	193553.00	-3.202E-02
10.97	0.2578	194017.50	-2.730E-02
16.48	0.3183	194785.00	-1.950E-02
22.01	0.3609	195349.50	-1.376E-02
27.55	0.3895	195792.00	-9.258E-03
32.91	0.4133	196146.00	-5.658E-03
38.49	0.4345	196469.50	-2.369E-03
44.08	0.4509	196766.25	6.482E-04
49.37	0.4669	196998.00	3.005E-03
54.90	0.4791	197219.50	5.257E-03
60.33	0.4885	197424.25	7.338E-03
65.87	0.4988	197616.75	9.296E-03
68.61	0.5033	197704.75	1.019E-02
70.68	0.5078	197768.25	1.084E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	130616.25	0.000E+00
0.78	0.0655	130504.00	-1.719E-03
1.65	0.1385	130259.25	-5.466E-03
2.78	0.2210	130082.00	-8.180E-03
4.09	0.2711	130265.75	-5.367E-03
5.57	0.3069	130550.25	-1.011E-03
6.87	0.3290	130730.25	1.746E-03
8.45	0.3494	130921.50	4.674E-03
11.09	0.3758	131181.25	8.651E-03
16.66	0.4174	131573.00	1.465E-02
22.01	0.4454	131887.75	1.947E-02
27.61	0.4685	132145.00	2.341E-02
33.15	0.4861	132348.75	2.653E-02
38.51	0.5000	132526.50	2.925E-02
44.07	0.5119	132690.00	3.175E-02
49.37	0.5231	132826.25	3.384E-02
55.08	0.5333	132954.25	3.580E-02
60.38	0.5411	133058.25	3.739E-02
66.05	0.5493	133158.00	3.892E-02
70.63	0.5554	133231.50	4.004E-02

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	156860.50	0.000E+00
1.45	0.1637	156869.50	1.148E-04
2.80	0.2803	156903.00	5.419E-04
4.17	0.3601	157043.50	2.333E-03
5.55	0.3871	157278.75	5.333E-03
6.90	0.4043	157433.75	7.309E-03
8.40	0.4169	157583.00	9.212E-03
10.41	0.4313	157772.00	1.162E-02
12.33	0.4431	157928.00	1.361E-02
16.44	0.4648	158206.25	1.716E-02
22.10	0.4865	158524.00	2.121E-02
27.49	0.5045	158776.75	2.443E-02
33.04	0.5192	158996.25	2.723E-02
38.35	0.5315	159175.25	2.951E-02
44.01	0.5413	159340.00	3.161E-02
49.44	0.5516	159457.50	3.349E-02
54.95	0.5585	159616.50	3.514E-02
60.41	0.5659	159734.50	3.664E-02
65.91	0.5728	159846.25	3.807E-02
70.64	0.5790	159931.25	3.915E-02

TEMPERATURA = 215.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	157873.75	0.000E+00
2.74	0.2926	157886.25	1.584E-04
4.61	0.4182	157994.50	1.530E-03
6.27	0.4468	158192.50	4.038E-03
8.72	0.4656	158392.00	6.565E-03
11.09	0.4787	158550.75	8.576E-03
13.66	0.4914	158705.50	1.054E-02
16.56	0.5024	158863.00	1.253E-02
19.31	0.5119	158996.00	1.422E-02
21.88	0.5205	159105.75	1.561E-02
27.48	0.5356	159328.75	1.843E-02
33.17	0.5475	159511.50	2.079E-02
38.60	0.5577	159682.00	2.291E-02
44.16	0.5671	159827.50	2.475E-02
49.44	0.5737	159956.75	2.639E-02
55.12	0.5814	160071.50	2.784E-02
60.60	0.5876	160173.75	2.914E-02
66.14	0.5937	160268.00	3.033E-02
70.63	0.5990	160341.75	3.127E-02

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	157834.50	0.000E+00
5.47	0.4325	157993.00	2.008E-03
11.05	0.5151	158348.50	6.513E-03
16.54	0.5352	158620.50	9.960E-03
21.99	0.5491	158833.30	1.266E-02
27.45	0.5618	159013.80	1.494E-02
33.04	0.5712	159179.00	1.704E-02
38.39	0.5806	159310.50	1.870E-02
44.01	0.5925	159442.00	2.037E-02
49.39	0.5949	159548.00	2.171E-02
54.86	0.6011	159645.00	2.294E-02
60.44	0.6064	159735.50	2.409E-02
65.88	0.6129	159821.50	2.518E-02
0.07	0.6142	159861.50	2.569E-02
70.68	0.6199	159889.50	2.604E-02

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159210.00	0.000E+00
5.53	0.5339	159266.50	7.098E-04
11.04	0.5794	159526.50	3.976E-03
16.48	0.5945	159699.00	6.143E-03
22.03	0.6059	159854.30	8.091E-03
27.52	0.6144	159979.80	9.670E-03
32.96	0.6226	160110.00	1.131E-02
38.46	0.6295	160202.50	1.217E-02
43.97	0.6334	160302.00	1.372E-02
49.41	0.6396	160386.00	1.477E-02
54.95	0.6449	160465.50	1.577E-02
60.41	0.6498	160532.00	1.661E-02
65.91	0.6526	160601.00	1.747E-02
68.62	0.6547	160628.00	1.781E-02
70.68	0.6559	160646.00	1.804E-02

TEMPERATURA = 190.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	160301.30	0.000E+00
5.57	0.5548	160317.00	1.959E-04
11.04	0.6191	160509.30	2.595E-03
16.51	0.6338	160642.50	4.257E-03
21.98	0.6428	160755.00	5.661E-03
27.46	0.6502	160841.30	6.737E-03
32.98	0.6575	160936.60	7.926E-03
38.49	0.6628	161011.50	8.861E-03
43.96	0.6669	161063.00	9.593E-03
49.46	0.6719	161152.50	1.062E-02
54.91	0.6755	161188.80	1.107E-02
60.40	0.6792	161213.00	1.175E-02
65.91	0.6833	161266.80	1.230E-02
68.58	0.6845	161309.50	1.258E-02
70.68	0.6858	161317.00	1.267E-02

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	265836.00	0.000E+00
5.02	0.5411	265842.00	4.514E-05
10.02	0.6625	266069.00	1.753E-03
15.00	0.6778	266220.50	2.893E-03
20.02	0.6867	266351.50	3.878E-03
25.00	0.6932	266467.00	4.747E-03
29.99	0.6984	266568.00	5.507E-03
35.10	0.7024	266663.00	6.222E-03
40.00	0.7069	266747.50	6.858E-03
45.01	0.7109	266817.00	7.380E-03
50.02	0.7137	266891.00	7.937E-03
55.01	0.7164	266954.00	8.411E-03
60.03	0.7190	267015.50	8.874E-03
65.02	0.7214	267064.00	9.239E-03
70.01	0.7238	267114.50	9.619E-03
72.05	0.7252	267136.00	9.780E-03

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	267084.50	0.000E+00
5.00	0.5345	267082.50	-1.498E-05
10.02	0.5916	267254.50	1.273E-03
15.00	0.7126	267365.00	2.100E-03
20.00	0.7224	267363.00	2.834E-03
25.00	0.7273	267544.50	3.445E-03
30.00	0.7322	267625.50	4.051E-03
35.00	0.7363	267695.00	4.572E-03
39.94	0.7396	267753.00	5.017E-03
45.00	0.7428	267812.00	5.448E-03
50.00	0.7449	267851.50	5.818E-03
55.00	0.7478	267912.00	6.197E-03
60.00	0.7494	267958.00	6.541E-03
65.00	0.7514	267991.50	6.792E-03
70.08	0.7531	268036.00	7.125E-03
72.05	0.7547	268045.00	7.192E-03

TEMPERATURA = 140.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	269725.50	0.000E+00
5.00	0.5362	269729.00	2.595E-05
10.01	0.7465	269810.50	6.303E-04
15.03	0.7904	269870.50	1.075E-03
20.03	0.7956	269905.50	1.335E-03
25.02	0.7985	269938.50	1.579E-03
30.01	0.8017	269971.50	1.824E-03
34.99	0.8041	269997.00	2.013E-03
40.00	0.8061	270020.50	2.187E-03
45.00	0.8086	270045.00	2.369E-03
50.00	0.8094	270063.00	2.503E-03
55.01	0.8106	270081.00	2.636E-03
60.00	0.8122	270102.50	2.795E-03
65.02	0.8134	270117.00	2.903E-03
70.01	0.8142	270130.00	2.999E-03
72.05	0.8154	270137.50	3.055E-03

TEMPERATURA = 160.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	268115.50	0.000E+00
5.00	0.5325	268116.50	7.459E-06
10.01	0.7263	268257.50	1.059E-03
15.00	0.7437	268335.00	1.637E-03
20.00	0.7510	268400.50	2.126E-03
24.98	0.7559	268462.50	2.588E-03
30.03	0.7595	268524.50	3.051E-03
35.00	0.7628	268575.00	3.428E-03
40.01	0.7652	268622.00	3.778E-03
45.00	0.7677	268664.00	4.092E-03
50.02	0.7693	268700.50	4.364E-03
55.01	0.7709	268733.00	4.606E-03
60.00	0.7717	268767.00	4.860E-03
65.02	0.7735	268796.00	5.076E-03
70.00	0.7750	268821.00	5.263E-03
72.05	0.7762	268836.00	5.375E-03

TEMPERATURA = 120.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	270957.00	0.000E+00
5.00	0.5352	270957.00	0.000E+00
10.01	0.7926	270989.00	2.362E-04
12.50	0.8179	270998.50	3.063E-04
15.01	0.8268	271035.00	5.757E-04
20.00	0.8341	271058.50	7.492E-04
25.00	0.8362	271076.50	8.821E-04
30.01	0.8390	271091.50	9.928E-04
35.00	0.8407	271107.00	1.107E-03
40.00	0.8423	271120.00	1.203E-03
45.00	0.8431	271129.00	1.270E-03
50.02	0.8447	271138.00	1.336E-03
55.00	0.8468	271148.00	1.410E-03
60.01	0.8472	271155.00	1.461E-03
65.02	0.8472	271161.00	1.506E-03
70.01	0.8472	271164.00	1.529E-03
72.05	0.8472	271167.00	1.550E-03

TEMPERATURA = 150.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	268982.00	0.000E+00
5.03	0.5375	268980.00	-1.487E-05
10.00	0.7497	269093.00	8.253E-04
14.97	0.7693	269148.00	1.234E-03
20.00	0.7752	269202.00	1.636E-03
25.00	0.7801	269248.00	1.978E-03
30.01	0.7836	269292.00	2.305E-03
35.00	0.7858	269328.00	2.573E-03
40.00	0.7887	269363.00	2.833E-03
45.01	0.7909	269395.50	3.075E-03
50.03	0.7924	269422.00	3.272E-03
54.98	0.7934	269448.00	3.465E-03
59.99	0.7950	269468.00	3.614E-03
65.02	0.7969	269486.00	3.747E-03
70.00	0.7977	269506.00	3.896E-03
72.05	0.7983	269512.50	3.945E-03

TEMPERATURA = 100.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	271911.50	0.000E+00
4.99	0.5387	271916.50	3.678E-05
10.01	0.8181	271870.00	-3.052E-04
15.00	0.8611	271756.00	-1.070E-03
17.50	0.8659	271920.00	6.252E-05
20.00	0.8680	271937.50	1.912E-04
25.01	0.8708	271950.50	2.869E-04
30.01	0.8736	271956.00	3.273E-04
35.00	0.8748	271964.50	3.898E-04
40.00	0.8757	271970.50	4.340E-04
45.00	0.8773	271976.00	4.744E-04
50.00	0.8785	271979.50	5.002E-04
55.00	0.8789	271980.00	5.038E-04
60.01	0.8789	271987.00	5.553E-04
65.02	0.8789	271985.50	5.443E-04
70.01	0.8789	271984.50	5.367E-04
72.05	0.8789	271985.50	5.443E-04

TEMPERATURA = 80.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	272586.00	0.000E+00
5.00	0.5400	272588.50	1.834E-05
10.00	0.8336	272585.00	-1.541E-04
14.99	0.8880	272444.50	-1.038E-03
20.02	0.8965	272375.00	-1.548E-03
25.00	0.8986	272553.00	-2.421E-04
30.00	0.9010	272557.50	-2.091E-04
35.02	0.9018	272561.50	-1.798E-04
40.01	0.9026	272564.50	-1.577E-04
45.01	0.9043	272568.00	-1.321E-04
50.02	0.9051	272568.00	-1.321E-04
55.00	0.9051	272569.00	-1.247E-04
60.03	0.9051	272567.00	-1.394E-04
64.99	0.9051	272565.50	-1.504E-04
70.00	0.9051	272564.00	-1.614E-04
72.05	0.9051	272562.00	-1.761E-04

TEMPERATURA = 40.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	273541.00	0.000E+00
5.00	0.5430	273541.50	3.656E-06
10.02	0.8721	273519.50	-1.572E-04
15.00	0.9479	273455.00	-6.288E-04
20.00	0.9604	273379.50	-1.181E-03
25.00	0.9637	273302.00	-1.747E-03
30.00	0.9669	273251.50	-2.095E-03
35.05	0.9683	273306.00	-1.718E-03
40.01	0.9690	273388.50	-1.115E-03
45.01	0.9698	273391.50	-1.093E-03
50.00	0.9711	273390.50	-1.100E-03
55.00	0.9726	273387.00	-1.126E-03
60.01	0.9728	273387.00	-1.126E-03
65.02	0.9728	273385.50	-1.137E-03
70.02	0.9728	273381.00	-1.170E-03
72.04	0.9728	273380.00	-1.177E-03

TEMPERATURA = 60.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	273156.50	0.000E+00
5.44	0.5884	273162.00	4.027E-05
10.00	0.8620	273144.50	-8.786E-05
15.00	0.9205	273057.50	-7.249E-04
20.02	0.9314	272969.00	-1.373E-03
25.01	0.9350	272898.00	-1.893E-03
30.00	0.9362	273034.00	-8.969E-04
35.00	0.9374	273061.50	-6.956E-04
40.00	0.9395	273063.00	-6.846E-04
45.01	0.9403	273059.50	-7.102E-04
50.02	0.9411	273063.00	-6.846E-04
55.02	0.9411	273060.00	-7.066E-04
60.01	0.9411	273055.00	-7.432E-04
65.02	0.9411	273052.00	-7.651E-04
70.01	0.9411	273050.00	-7.798E-04
72.04	0.9411	273050.50	-7.761E-04

TEMPERATURA = 20.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	273861.50	0.000E+00
5.00	0.5306	273862.00	3.651E-06
9.98	0.8791	273737.00	-9.092E-04
14.99	0.9629	273679.00	-1.333E-03
20.00	0.9724	273600.50	-1.906E-03
25.00	0.9759	273525.50	-2.454E-03
30.00	0.9771	273467.00	-2.881E-03
35.00	0.9783	273468.50	-2.870E-03
40.00	0.9791	273518.50	-2.505E-03
45.00	0.9795	273562.00	-2.187E-03
50.00	0.9799	273570.50	-2.125E-03
55.00	0.9799	273571.00	-2.122E-03
60.01	0.9799	273570.00	-2.129E-03
65.00	0.9799	273571.00	-2.122E-03
70.01	0.9799	273570.50	-2.125E-03
72.02	0.9799	273567.50	-2.147E-03

C₃₃₃₃ (K//c̄), H//c̄:

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	265436.50	0.000E+00
2.50	0.0054	265433.25	-2.449E-05
5.00	0.0109	265426.25	-7.723E-05
10.00	0.0199	265403.25	-2.505E-04
15.00	0.0300	265365.25	-5.369E-04
19.99	0.0402	265308.75	-9.626E-04
25.01	0.0502	265239.25	-1.486E-03
30.01	0.0598	265156.00	-2.113E-03
35.00	0.0699	265059.25	-2.842E-03
40.01	0.0801	264954.25	-3.634E-03
45.00	0.0896	264835.25	-4.530E-03
50.05	0.0990	264705.75	-5.506E-03
54.98	0.1084	264569.25	-6.535E-03
60.00	0.1176	264426.75	-7.608E-03
65.00	0.1266	264278.75	-8.723E-03
70.04	0.1357	264125.50	-9.878E-03
72.05	0.1396	264060.75	-1.037E-02

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	265471.00	0.000E+00
5.02	0.0108	265459.75	-8.476E-05
10.01	0.0213	265431.50	-2.976E-04
15.00	0.0320	265383.75	-6.573E-04
20.00	0.0425	265315.25	-1.173E-03
24.98	0.0528	265233.25	-1.791E-03
30.01	0.0632	265133.75	-2.541E-03
35.00	0.0732	265020.75	-3.392E-03
40.00	0.0835	264888.50	-4.388E-03
45.00	0.0934	264749.00	-5.439E-03
50.00	0.1032	264599.75	-6.564E-03
55.01	0.1129	264439.00	-7.775E-03
60.01	0.1221	264266.25	-9.076E-03
64.99	0.1317	264094.00	-1.037E-02
70.01	0.1406	263918.25	-1.170E-02
72.07	0.1435	263846.00	-1.224E-02

TEMPERATURA = 280.0 K

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	265471.25	0.000E+00
4.99	0.0121	265458.75	-9.417E-05
10.00	0.0234	265418.25	-3.993E-04
15.01	0.0354	265363.00	-8.155E-04
20.00	0.0471	265280.50	-1.437E-03
25.01	0.0585	265174.25	-2.239E-03
30.00	0.0698	265049.25	-3.179E-03
35.00	0.0811	264903.50	-4.277E-03
40.00	0.0921	264744.75	-5.473E-03
45.00	0.1031	264570.50	-6.786E-03
49.99	0.1137	264389.75	-8.148E-03
55.00	0.1242	264194.00	-9.623E-03
60.00	0.1343	263997.25	-1.110E-02
65.00	0.1446	263794.75	-1.263E-02
70.00	0.1546	263597.00	-1.412E-02
72.07	0.1582	263508.75	-1.479E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	261852.00	0.000E+00
5.02	0.0165	261828.25	-1.793E-04
9.98	0.0323	261752.25	-7.533E-04
14.99	0.0478	261633.00	-1.651E-03
20.00	0.0632	261470.00	-2.885E-03
25.01	0.0787	261269.50	-4.399E-03
29.99	0.0940	261038.50	-6.143E-03
35.00	0.1085	261784.25	-8.063E-03
40.00	0.1228	261509.75	-1.014E-02
44.99	0.1369	261225.50	-1.228E-02
50.00	0.1504	261934.50	-1.448E-02
55.00	0.1635	262645.25	-1.666E-02
60.01	0.1761	262358.00	-1.893E-02
64.99	0.1885	262074.00	-2.098E-02
70.00	0.1998	261799.50	-2.305E-02
72.02	0.2045	261692.00	-2.386E-02

TEMPERATURA = 270.0 K

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	265411.00	0.000E+00
5.02	0.0132	265395.25	-1.187E-04
10.00	0.0266	265349.00	-4.672E-04
15.00	0.0399	265273.75	-1.034E-03
20.00	0.0532	265168.50	-1.827E-03
25.00	0.0660	265037.00	-2.818E-03
30.01	0.0789	264877.75	-4.018E-03
35.00	0.0917	264702.75	-5.337E-03
39.98	0.1041	264510.00	-6.789E-03
45.00	0.1164	264301.50	-8.361E-03
50.02	0.1282	264087.25	-9.975E-03
54.98	0.1401	263863.75	-1.166E-02
60.03	0.1511	263632.50	-1.340E-02
65.02	0.1624	263401.00	-1.515E-02
69.98	0.1737	263169.75	-1.689E-02
72.07	0.1771	263074.50	-1.761E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	263933.25	0.000E+00
5.00	0.0183	263895.00	-2.898E-04
10.00	0.0360	263803.50	-9.832E-04
15.00	0.0541	263663.00	-2.048E-03
20.03	0.0716	263485.50	-3.393E-03
25.01	0.0886	263268.50	-5.037E-03
30.00	0.1060	263030.00	-6.815E-03
35.00	0.1223	262776.25	-8.767E-03
39.98	0.1388	262509.25	-1.079E-02
45.01	0.1542	262234.50	-1.287E-02
50.00	0.1693	261961.50	-1.494E-02
54.98	0.1839	261691.00	-1.699E-02
60.00	0.1979	261414.50	-1.909E-02
65.02	0.2115	261159.25	-2.102E-02
70.01	0.2250	260913.75	-2.288E-02
72.04	0.2307	260822.00	-2.358E-02

TEMPERATURA = 260.0 K

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	265292.50	0.000E+00
4.99	0.0163	265181.50	-1.584E-04
9.98	0.0311	265118.50	-6.335E-04
15.00	0.0471	265017.75	-1.393E-03
20.00	0.0620	264881.00	-2.425E-03
25.00	0.0768	264716.50	-3.665E-03
29.99	0.0913	264526.00	-5.102E-03
34.99	0.1054	264309.00	-6.738E-03
40.00	0.1190	264068.75	-8.550E-03
45.01	0.1325	263819.25	-1.043E-02
50.00	0.1454	263553.25	-1.244E-02
55.00	0.1581	263285.00	-1.466E-02
60.00	0.1703	263017.50	-1.648E-02
65.03	0.1819	262744.50	-1.851E-02
70.00	0.1932	262468.50	-2.047E-02
72.02	0.1984	262381.75	-2.127E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	262824.00	0.000E+00
5.00	0.0200	262790.50	-2.549E-04
9.98	0.0390	262691.00	-1.012E-03
15.00	0.0581	262541.00	-2.154E-03
20.00	0.0769	262369.75	-3.457E-03
25.00	0.0954	262180.00	-4.901E-03
29.99	0.1135	261990.25	-6.345E-03
35.02	0.1311	261790.50	-7.865E-03
40.00	0.1482	261598.25	-9.328E-03
45.01	0.1653	261403.00	-1.081E-02
49.99	0.1825	261212.25	-1.226E-02
55.00	0.1997	261018.75	-1.374E-02
60.00	0.2163	260821.25	-1.521E-02
65.02	0.2317	260632.50	-1.668E-02
69.98	0.2475	260445.75	-1.810E-02
72.04	0.2540	260369.75	-1.868E-02

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	262601.50	0.000E+00
5.00	0.0225	262520.00	-6.207E-04
9.98	0.0449	262243.75	-2.725E-03
15.00	0.0667	261931.50	-5.103E-03
50.02	0.2058	261075.00	-1.163E-02
55.00	0.2284	261200.50	-1.067E-02
60.00	0.2457	261280.50	-1.006E-02
65.00	0.2634	261310.75	-9.830E-03
70.00	0.2789	261305.50	-9.870E-03
72.04	0.2851	261296.50	-9.939E-03

C₃₁₃₁ (\vec{k}/\vec{a} , \vec{p}/\vec{c}), \vec{h}/\vec{a} :

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157309.75	0.000E+00
5.02	0.0165	157312.25	3.178E-05
10.00	0.0323	157321.75	1.526E-04
15.00	0.0484	157335.25	3.242E-04
20.00	0.0644	157353.25	5.530E-04
25.00	0.0800	157379.75	8.900E-04
29.99	0.0954	157412.75	1.310E-03
35.00	0.1106	157448.00	1.758E-03
40.00	0.1252	157490.00	2.242E-03
45.00	0.1394	157535.50	2.870E-03
50.00	0.1533	157584.25	3.490E-03
55.01	0.1667	157635.00	4.135E-03
59.99	0.1794	157684.25	4.761E-03
65.02	0.1918	157737.50	5.438E-03
70.00	0.2037	157794.00	6.157E-03
72.07	0.2089	157815.00	6.424E-03

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157976.75	0.000E+00
5.00	0.0230	157986.25	1.203E-04
10.00	0.0455	158006.25	3.735E-04
15.00	0.0680	158034.00	7.248E-04
20.02	0.0905	158073.50	1.225E-03
25.00	0.1121	158122.00	1.839E-03
30.00	0.1328	158174.50	2.504E-03
35.02	0.1523	158237.50	3.301E-03
40.00	0.1715	158302.25	4.121E-03
45.01	0.1892	158373.50	5.023E-03
50.00	0.2066	158442.75	5.900E-03
55.00	0.2225	158516.75	6.836E-03
60.00	0.2379	158593.25	7.805E-03
65.00	0.2523	158664.00	8.791E-03
70.00	0.2660	158739.75	9.660E-03
72.07	0.2720	158769.75	1.004E-02

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157611.75	0.000E+00
4.99	0.0182	157615.00	4.124E-05
10.00	0.0360	157626.75	1.903E-04
15.01	0.0536	157647.00	4.473E-04
20.02	0.0713	157678.00	8.407E-04
25.00	0.0884	157713.50	1.291E-03
30.00	0.1058	157756.50	1.837E-03
35.02	0.1227	157804.25	2.443E-03
40.00	0.1394	157856.25	3.103E-03
45.01	0.1559	157911.75	3.807E-03
50.02	0.1711	157972.25	4.575E-03
55.00	0.1859	158033.00	5.345E-03
60.01	0.2002	158093.00	6.197E-03
65.03	0.2137	158156.75	6.916E-03
70.00	0.2270	158219.25	7.709E-03
72.07	0.2319	158245.25	8.039E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157084.50	0.000E+00
5.00	0.0279	157098.50	1.782E-04
10.00	0.0557	157122.75	4.670E-04
15.00	0.0828	157164.00	1.012E-03
20.00	0.1094	157216.75	1.681E-03
25.00	0.1354	157279.25	2.480E-03
30.00	0.1596	157350.25	3.384E-03
35.00	0.1825	157427.50	4.367E-03
40.00	0.2038	157509.00	5.405E-03
45.01	0.2241	157590.50	6.442E-03
50.03	0.2434	157673.00	7.493E-03
54.98	0.2606	157752.25	8.502E-03
60.00	0.2768	157834.00	9.543E-03
65.00	0.2923	157912.50	1.054E-02
69.98	0.3069	157987.75	1.150E-02
72.04	0.3120	158018.25	1.189E-02

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157455.00	0.000E+00
5.00	0.0381	157465.25	1.302E-04
10.01	0.0750	157497.00	5.335E-04
15.00	0.1107	157545.00	1.143E-03
19.99	0.1442	157610.00	1.969E-03
25.00	0.1751	157686.50	2.941E-03
30.00	0.2045	157769.25	3.992E-03
34.99	0.2302	157854.00	5.068E-03
40.00	0.2548	157941.00	6.173E-03
45.00	0.2771	158032.75	7.339E-03
50.02	0.2972	158120.00	8.447E-03
55.00	0.3154	158207.50	9.558E-03
60.03	0.3315	158295.50	1.068E-02
65.02	0.3461	158378.00	1.172E-02
70.00	0.3600	158459.25	1.276E-02
72.05	0.3655	158491.00	1.316E-02

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	155237.75	0.000E+00
5.00	0.0513	155240.75	3.865E-05
9.98	0.1001	155252.25	1.868E-04
15.00	0.1444	155282.00	5.701E-04
20.00	0.1846	155330.00	1.188E-03
25.01	0.2207	155400.50	2.097E-03
30.01	0.2541	155485.25	3.189E-03
35.00	0.2822	155579.25	4.400E-03
40.00	0.3087	155677.00	5.659E-03
44.97	0.3314	155771.00	6.870E-03
49.92	0.3513	155871.50	8.165E-03
55.01	0.3702	155968.00	9.408E-03
60.00	0.3853	156059.00	1.058E-02
65.02	0.3989	156149.75	1.175E-02
70.01	0.4122	156237.75	1.288E-02
72.05	0.4165	156270.75	1.331E-02

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	155536.00	0.000E+00
2.50	0.0468	155474.75	-7.876E-04
5.03	0.0900	155334.00	-2.597E-03
7.51	0.1289	155193.25	-4.407E-03
10.00	0.1648	155094.25	-5.680E-03
12.50	0.1964	155047.50	-6.282E-03
15.00	0.2257	155047.00	-6.288E-03
17.50	0.2504	155080.00	-5.864E-03
20.02	0.2737	155129.75	-5.224E-03
25.01	0.3098	155268.25	-3.443E-03
30.00	0.3418	155423.50	-1.447E-03
34.99	0.3678	155581.00	5.786E-04
40.00	0.3896	155738.25	2.601E-03
45.01	0.4084	155885.25	4.491E-03
50.02	0.4246	156021.75	6.246E-03
55.00	0.4387	156157.00	7.985E-03
60.00	0.4517	156275.00	9.503E-03
65.02	0.4626	156391.25	1.100E-02
70.01	0.4731	156502.00	1.242E-02
72.05	0.4771	156542.00	1.294E-02

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	155480.00	0.000E+00
2.52	0.0634	155108.75	-4.776E-03
5.02	0.1201	154503.25	-1.256E-02
7.50	0.1684	154176.25	-1.677E-02
10.01	0.2106	154133.75	-1.732E-02
12.52	0.2459	154212.00	-1.631E-02
15.00	0.2765	154345.50	-1.459E-02
17.48	0.3028	154494.00	-1.268E-02
20.00	0.3250	154645.50	-1.073E-02
25.01	0.3598	154929.75	-7.078E-03
30.00	0.3873	155193.75	-3.682E-03
35.00	0.4113	155428.50	-6.625E-04
40.01	0.4309	155637.00	2.020E-03
45.03	0.4471	155830.00	4.502E-03
50.00	0.4609	156006.00	6.766E-03
55.00	0.4731	156166.00	8.824E-03
60.00	0.4843	156314.50	1.073E-02
65.03	0.4940	156453.50	1.252E-02
70.01	0.5024	156573.25	1.406E-02
72.05	0.5045	156623.25	1.471E-02

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	151529.75	0.000E+00
15.00	0.3275	150807.75	-9.529E-03
17.51	0.3493	151231.75	-3.933E-03
19.99	0.3673	151591.75	8.183E-04
22.54	0.3820	151666.50	1.805E-03
25.00	0.3959	151905.50	4.959E-03
30.01	0.4196	152330.00	1.056E-02
35.02	0.4400	152672.75	1.509E-02
40.00	0.4572	152950.50	1.875E-02
45.00	0.4721	153195.75	2.199E-02
50.00	0.4843	153409.50	2.481E-02
54.98	0.4947	153598.00	2.730E-02
60.01	0.5054	153774.75	2.963E-02
64.99	0.5149	153929.00	3.167E-02
70.01	0.5221	154072.50	3.356E-02
72.05	0.5252	154127.75	3.429E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
20.03	0.3901	151515.75	0.000E+00
22.50	0.4066	151998.00	6.366E-03
25.00	0.4207	152427.00	1.203E-02
30.00	0.4464	153065.25	2.045E-02
35.03	0.4664	153549.50	2.685E-02
40.00	0.4838	153945.75	3.208E-02
44.99	0.4979	154265.76	3.630E-02
50.02	0.5093	154532.50	3.992E-02
54.98	0.5197	154769.75	4.295E-02
60.00	0.5289	154975.75	4.567E-02
65.02	0.5365	155165.75	4.818E-02
70.01	0.5434	155336.00	5.043E-02
72.05	0.5451	155398.25	5.125E-02

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
22.51	0.4742	152121.75	0.000E+00
25.00	0.4845	153989.50	2.456E-02
30.01	0.5014	154908.00	3.663E-02
35.02	0.5153	155607.25	4.583E-02
40.00	0.5281	156123.50	5.261E-02
45.00	0.5389	156550.75	5.823E-02
50.02	0.5478	156901.75	6.284E-02
55.00	0.5560	157194.25	6.669E-02
60.01	0.5634	157456.00	7.013E-02
65.03	0.5699	157677.50	7.304E-02
70.01	0.5763	157876.25	7.568E-02
72.05	0.5778	157958.00	7.673E-02

TEMPERATURA = 215.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
30.00	0.5335	154173.00	0.000E+00
32.48	0.5398	154639.50	6.052E-03
35.00	0.5460	155052.50	1.141E-02
40.01	0.5558	155721.75	2.009E-02
45.01	0.5653	156240.00	2.681E-02
50.02	0.5748	156666.25	3.234E-02
55.00	0.5825	157028.50	3.704E-02
60.00	0.5898	157328.00	4.093E-02
65.02	0.5960	157595.50	4.440E-02
70.00	0.6018	157827.75	4.741E-02
72.07	0.6033	157916.25	4.856E-02

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
30.01	0.5657	152105.50	0.000E+00
32.47	0.5711	152668.50	7.403E-03
35.02	0.5749	153166.25	1.395E-02
40.00	0.5847	153979.50	2.464E-02
45.03	0.5917	154596.00	3.275E-02
50.00	0.5998	155104.50	3.943E-02
54.98	0.6052	155519.75	4.489E-02
60.00	0.6105	155873.50	4.954E-02
65.02	0.6158	156176.50	5.353E-02
70.02	0.6211	156443.75	5.704E-02
72.05	0.6244	156540.25	5.831E-02

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
35.00	0.6229	151928.25	0.000E+00
37.51	0.6260	152491.50	7.415E-03
40.01	0.6303	153011.75	1.426E-02
45.00	0.6364	153842.00	2.519E-02
50.00	0.6430	154512.50	3.402E-02
55.00	0.6487	155050.75	4.110E-02
60.01	0.6532	155517.25	4.725E-02
65.02	0.6581	155901.00	5.230E-02
70.01	0.6626	156231.00	5.664E-02
72.05	0.6639	156355.50	5.828E-02

TEMPERATURA = 190.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
40.00	0.6776	150772.75	0.000E+00
45.01	0.6821	151811.00	1.377E-02
50.02	0.6862	152634.75	2.470E-02
54.98	0.6903	153296.75	3.348E-02
60.00	0.6935	153851.25	4.084E-02
65.00	0.6960	154317.75	4.702E-02
69.98	0.6997	154721.25	5.238E-02
72.07	0.7009	154871.25	5.437E-02

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
40.02	0.7122	150855.75	0.000E+00
45.00	0.7161	152120.25	1.676E-02
50.00	0.7203	153139.50	3.028E-02
55.00	0.7238	153953.00	4.106E-02
60.00	0.7259	154628.75	5.002E-02
65.02	0.7287	155200.75	5.760E-02
70.02	0.7320	155696.00	6.417E-02
72.05	0.7324	155864.00	6.640E-02

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
45.00	0.7386	151292.00	0.000E+00
47.50	0.7404	151920.00	8.302E-03
50.00	0.7419	152461.00	1.545E-02
55.00	0.7439	153407.75	2.797E-02
60.00	0.7476	154192.75	3.835E-02
65.02	0.7500	154854.00	4.709E-02
70.01	0.7527	155406.25	5.439E-02
72.07	0.7537	155618.00	5.719E-02

TEMPERATURA = 160.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
47.50	0.7771	152483.00	0.000E+00
49.99	0.7780	153094.75	8.024E-03
52.50	0.7791	153663.50	1.548E-02
55.01	0.7801	154174.50	2.219E-02
60.01	0.7819	155066.50	3.389E-02
65.00	0.7840	155799.50	4.350E-02
69.98	0.7858	156443.25	5.194E-02
72.07	0.7864	156679.00	5.504E-02

TEMPERATURA = 150.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
47.50	0.7994	149646.25	0.000E+00
50.02	0.8003	150304.25	8.794E-03
52.50	0.8012	150843.00	1.653E-02
55.01	0.8018	151412.75	2.361E-02
60.00	0.8040	152313.50	3.605E-02
65.00	0.8054	153111.75	4.632E-02
70.00	0.8061	153772.00	5.514E-02
72.07	0.8069	154021.25	5.847E-02

TEMPERATURA = 140.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
49.99	0.6245	149969.50	0.000E+00
52.51	0.6257	150602.50	8.112E-03
55.00	0.6265	151166.25	1.596E-02
60.01	0.6277	152158.50	2.919E-02
65.02	0.6290	152983.50	4.019E-02
70.00	0.6302	153593.25	4.966E-02
72.07	0.6310	153961.50	5.321E-02

TEMPERATURA = 120.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
57.52	0.8690	153002.50	0.000E+00
60.00	0.8695	153488.75	6.356E-03
62.51	0.8699	153966.25	1.286E-02
65.00	0.8703	154402.50	1.830E-02
70.00	0.8711	155159.50	2.820E-02
72.07	0.8715	155459.25	3.211E-02

C₃₁₃₁ (\vec{k}/\vec{a} , \vec{p}/\vec{c}), \vec{H}/\vec{b} :

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161133.25	0.000E+00
5.02	0.0157	161134.25	1.241E-05
10.00	0.0316	161134.25	1.241E-05
14.99	0.0469	161136.25	3.724E-05
20.02	0.0628	161139.50	7.758E-05
25.00	0.0782	161140.25	8.688E-05
30.01	0.0934	161138.75	6.827E-05
35.00	0.1085	161139.50	7.759E-05
40.00	0.1228	161134.75	1.562E-05
45.03	0.1366	161131.75	-1.862E-05
50.02	0.1500	161126.75	-3.068E-05
55.02	0.1628	161119.00	-1.769E-04
60.01	0.1750	161108.50	-3.072E-04
64.99	0.1863	161097.75	-4.406E-04
70.00	0.1973	161088.50	-5.554E-04
72.12	0.2023	161082.50	-6.299E-04

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161487.75	0.000E+00
4.99	0.0186	161449.25	1.858E-05
9.98	0.0370	161488.50	9.289E-06
15.00	0.0557	161490.00	2.787E-05
19.99	0.0741	161494.25	8.050E-05
25.00	0.0920	161496.50	1.081E-04
30.00	0.1096	161495.00	8.979E-05
35.00	0.1262	161495.00	8.979E-05
40.00	0.1426	161493.00	6.502E-05
45.00	0.1580	161488.25	6.192E-06
50.00	0.1728	161480.00	-9.599E-05
55.00	0.1871	161471.75	-1.982E-04
60.03	0.2007	161461.25	-3.282E-04
65.00	0.2136	161448.00	-4.923E-04
70.00	0.2260	161434.00	-6.657E-04
72.13	0.2313	161432.00	-6.905E-04

TEMPERATURA = 100.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
62.50	0.9090	152405.50	0.000E+00
65.00	0.9098	152802.00	5.203E-03
70.00	0.9106	153529.25	1.475E-02
72.07	0.9114	153786.50	1.812E-02

TEMPERATURA = 80.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
65.00	0.9517	151779.00	0.000E+00
67.50	0.9519	152105.00	4.296E-03
69.98	0.9521	152397.00	8.012E-03
72.07	0.9523	152632.50	1.125E-02

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161839.25	0.000E+00
5.02	0.0218	161840.25	1.236E-05
10.00	0.0443	161842.50	4.016E-05
14.99	0.0664	161843.50	5.252E-05
20.02	0.0877	161843.75	5.561E-05
25.00	0.1086	161844.25	6.179E-05
30.01	0.1289	161843.50	5.252E-05
35.00	0.1486	161842.50	4.016E-05
40.00	0.1677	161835.00	-5.252E-05
45.03	0.1859	161829.00	-1.267E-04
50.02	0.2026	161818.25	-2.595E-04
55.02	0.2184	161808.00	-3.862E-04
60.01	0.2335	161792.00	-5.839E-04
64.99	0.2477	161779.00	-7.446E-04
70.00	0.2613	161758.00	-1.004E-03
72.13	0.2664	161752.25	-1.075E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162228.50	0.000E+00
5.03	0.0260	162231.50	3.698E-05
10.00	0.0530	162230.50	2.466E-05
15.00	0.0794	162229.00	6.164E-05
20.00	0.1047	162229.00	6.164E-05
25.00	0.1307	162224.00	-5.543E-05
30.00	0.1539	162218.25	-1.264E-04
35.00	0.1768	162208.00	-2.527E-04
40.01	0.1982	162192.50	-4.438E-04
45.00	0.2177	162178.25	-6.195E-04
50.02	0.2353	162160.50	-8.383E-04
54.98	0.2521	162140.50	-1.085E-03
60.03	0.2676	162118.50	-1.356E-03
65.03	0.2821	162093.75	-1.661E-03
70.02	0.2969	162069.00	-1.966E-03
72.15	0.3041	162060.00	-2.077E-03

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162612.00	0.000E+00
5.00	0.0327	162607.50	-5.535E-05
10.00	0.0655	162600.00	-1.476E-04
15.00	0.0974	162586.75	-3.106E-04
20.00	0.1291	162570.50	-5.104E-04
25.00	0.1590	162546.50	-8.056E-04
30.01	0.1870	162521.00	-1.119E-03
35.00	0.2111	162486.00	-1.550E-03
40.01	0.2347	162460.00	-1.869E-03
44.99	0.2555	162429.50	-2.245E-03
50.00	0.2750	162393.50	-2.647E-03
55.02	0.2930	162363.50	-3.056E-03
60.00	0.3093	162332.50	-3.438E-03
65.03	0.3236	162296.50	-3.880E-03
70.00	0.3376	162268.25	-4.228E-03
72.15	0.3425	162256.25	-4.375E-03

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162979.00	0.000E+00
5.00	0.0590	162963.50	-1.902E-04
9.98	0.1143	162921.50	-7.956E-04
15.00	0.1643	162860.25	-1.157E-03
19.99	0.2062	162793.75	-2.273E-03
25.01	0.2431	162721.25	-3.163E-03
30.01	0.2759	162651.50	-3.896E-03
35.02	0.3029	162604.00	-4.602E-03
40.00	0.3268	162552.75	-5.231E-03
45.01	0.3471	162508.00	-5.780E-03
50.00	0.3654	162465.50	-6.301E-03
54.98	0.3811	162427.00	-6.774E-03
60.00	0.3955	162388.00	-7.252E-03
65.02	0.4084	162355.75	-7.649E-03
70.02	0.4197	162320.25	-8.084E-03
72.15	0.4242	162305.25	-8.268E-03

C₃₁₃₁ (K//ā, p//c), Ĥ//ĉ:

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159715.00	0.000E+00
5.02	0.0109	159718.25	4.070E-05
9.98	0.0194	159719.50	5.635E-05
15.01	0.0300	159718.75	4.696E-05
20.03	0.0402	159718.00	3.757E-05
25.02	0.0502	159715.50	6.261E-06
30.00	0.0598	159716.50	1.878E-05
35.02	0.0700	159711.00	-5.009E-05
40.02	0.0801	159711.75	-4.070E-05
45.00	0.0896	159708.00	-8.766E-05
50.00	0.0990	159696.75	-2.285E-04
55.02	0.1081	159688.00	-3.381E-04
60.01	0.1176	159684.50	-3.819E-04
65.00	0.1266	159669.50	-5.698E-04
70.01	0.1359	159660.50	-6.825E-04
72.04	0.1396	159658.50	-7.075E-04

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	160507.75	0.000E+00
10.00	0.0239	160501.50	-7.788E-05
20.02	0.0474	160506.75	-1.246E-05
30.00	0.0698	160506.00	-2.131E-05
39.98	0.0921	160507.50	-3.115E-06
50.00	0.1137	160499.75	-9.963E-05
60.01	0.1343	160486.75	-2.617E-04
70.00	0.1546	160479.50	-3.520E-04
72.02	0.1582	160475.50	-4.018E-04

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	160879.50	0.000E+00
10.01	0.0266	160894.75	1.396E-04
20.02	0.0532	160900.00	2.548E-04
29.99	0.0789	160903.75	3.015E-04
40.00	0.1041	160908.50	3.605E-04
50.02	0.1282	160909.50	3.729E-04
59.99	0.1511	160906.00	3.294E-04
70.01	0.1737	160897.00	2.176E-04
72.04	0.1771	160898.50	2.362E-04

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	160111.25	0.000E+00
5.02	0.0108	160110.25	-1.249E-05
10.00	0.0213	160109.25	-2.498E-05
14.99	0.0320	160110.00	-1.561E-05
20.00	0.0425	160107.75	-4.372E-05
30.00	0.0632	160105.00	-7.807E-05
40.01	0.0835	160105.00	-7.807E-05
50.00	0.1032	160095.50	-1.967E-04
60.00	0.1221	160090.00	-2.654E-04
70.01	0.1406	160071.75	-4.934E-04
72.02	0.1435	160065.75	-5.684E-04

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161268.75	0.000E+00
10.00	0.0311	161276.50	9.611E-05
20.00	0.0620	161280.75	1.488E-04
30.00	0.0913	161289.50	2.573E-04
35.00	0.1054	161292.75	2.976E-04
40.00	0.1190	161296.50	3.441E-04
45.01	0.1325	161300.75	3.969E-04
50.00	0.1454	161300.75	3.969E-04
55.00	0.1581	161300.25	3.907E-04
60.00	0.1703	161301.50	4.062E-04
64.99	0.1819	161300.25	3.907E-04
70.00	0.1932	161298.75	3.720E-04
72.02	0.1984	161298.00	3.627E-04

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161648.00	0.000E+00
10.00	0.0323	161651.50	4.330E-05
20.00	0.0632	161658.00	1.237E-04
30.00	0.0940	161668.50	2.536E-04
40.00	0.1228	161680.25	3.920E-04
50.03	0.1504	161701.75	6.650E-04
54.98	0.1635	161704.75	7.921E-04
60.00	0.1761	161708.25	7.454E-04
65.02	0.1885	161709.00	7.547E-04
70.00	0.1998	161709.00	7.547E-04
72.04	0.2045	161709.00	7.547E-04

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162039.25	0.000E+00
10.00	0.0360	162041.50	6.480E-05
19.99	0.0716	162058.75	2.407E-04
25.00	0.0886	162068.25	3.579E-04
30.00	0.1060	162080.00	5.030E-04
35.00	0.1223	162092.50	6.572E-04
40.00	0.1388	162105.50	8.177E-04
45.00	0.1542	162113.50	9.164E-04
50.00	0.1693	162120.50	1.003E-03
55.00	0.1839	162126.50	1.077E-03
60.00	0.1979	162137.50	1.213E-03
65.00	0.2115	162144.00	1.293E-03
70.00	0.2250	162146.00	1.318E-03
72.04	0.2307	162145.50	1.311E-03

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162003.50	0.000E+00
5.00	0.0200	162010.50	8.642E-05
10.00	0.0390	162028.50	3.086E-04
15.00	0.0581	162051.50	5.926E-04
20.00	0.0769	162080.00	9.444E-04
25.00	0.0954	162108.50	1.296E-03
30.00	0.1135	162143.25	1.725E-03
35.00	0.1311	162170.50	2.062E-03
40.00	0.1482	162199.75	2.423E-03
45.00	0.1653	162226.25	2.750E-03
50.02	0.1825	162248.50	3.025E-03
55.00	0.1997	162269.50	3.281E-03
60.01	0.2163	162285.50	3.481E-03
65.00	0.2317	162297.25	3.626E-03
70.00	0.2475	162308.75	3.768E-03
72.04	0.2540	162312.50	3.815E-03

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161847.75	0.000E+00
5.00	0.0225	161905.75	7.167E-04
10.04	0.0449	162089.50	2.987E-03
15.01	0.0667	162586.00	9.123E-03
20.02	0.0891	163331.50	1.834E-02
25.01	0.1113	163898.50	2.531E-02
30.00	0.1322	164294.75	3.024E-02
35.00	0.1525	164582.00	3.379E-02
40.00	0.1721	164780.00	3.623E-02
45.01	0.1905	164932.00	3.811E-02
49.99	0.2088	165031.50	3.934E-02
55.00	0.2284	165111.75	4.033E-02
60.03	0.2457	165171.50	4.107E-02
65.02	0.2634	165212.50	4.159E-02
70.01	0.2789	165244.50	4.197E-02
72.05	0.2851	165259.00	4.215E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162020.50	0.000E+00
5.02	0.0216	162008.75	-1.450E-04
10.00	0.0426	161960.25	-7.437E-04
15.03	0.0643	161863.25	-1.941E-03
19.99	0.0844	161777.25	-3.093E-03
25.01	0.1048	161658.50	-4.469E-03
30.00	0.1252	161472.25	-6.769E-03
35.00	0.1443	161222.25	-9.454E-03
40.02	0.1630	160975.50	-1.290E-02
50.00	0.1986	161580.00	-5.438E-03
55.01	0.2159	161971.00	-6.110E-04
60.00	0.2322	162217.75	2.435E-03
65.03	0.2489	162358.50	4.172E-03
70.00	0.2638	162452.00	5.326E-03
72.05	0.2692	162474.25	5.601E-03

C₁₃₁₃ (\vec{k}/\vec{c} , \vec{p}/\vec{a}), \vec{H}/\vec{a} :

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	217856.75	0.000E+00
5.00	0.0165	217841.50	-1.400E-04
10.00	0.0323	217839.50	-1.584E-04
14.99	0.0484	217843.75	-1.193E-04
24.98	0.0800	217856.75	0.000E+00
34.99	0.1106	217874.50	1.630E-04
45.01	0.1394	217879.00	2.013E-04
55.00	0.1667	217888.25	2.892E-04
65.05	0.1918	217902.50	4.200E-04
72.02	0.2089	217918.00	5.623E-04

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	218185.75	0.000E+00
7.50	0.0269	218181.25	-4.125E-05
20.00	0.0713	218182.25	-3.298E-05
30.01	0.1058	218194.75	8.250E-05
40.00	0.1399	218203.75	1.650E-04
55.00	0.1859	218225.50	3.614E-04
60.03	0.2002	218235.25	4.537E-04
65.02	0.2137	218245.25	5.454E-04
70.02	0.2270	218259.50	6.760E-04
72.01	0.2319	218263.50	7.127E-04

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	218458.25	0.000E+00
7.50	0.0344	218460.25	1.831E-05
14.97	0.0680	218463.00	4.319E-05
22.50	0.1011	218476.25	1.648E-04
29.99	0.1328	218491.25	3.021E-04
35.00	0.1523	218507.50	4.509E-04
40.00	0.1715	218525.50	6.157E-04
44.96	0.1892	218541.00	7.576E-04
50.00	0.2066	218555.25	8.880E-04
55.01	0.2225	218580.75	1.121E-03
60.00	0.2379	218598.50	1.284E-03
64.98	0.2523	218619.00	1.472E-03
70.02	0.2660	218646.50	1.723E-03
71.94	0.2720	218657.25	1.822E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	218835.00	0.000E+00
7.50	0.0416	218840.00	4.570E-05
15.04	0.0828	218849.50	1.325E-04
19.98	0.1094	218858.25	2.125E-04
24.98	0.1354	218870.25	3.222E-04
30.03	0.1596	218890.50	5.072E-04
35.02	0.1825	218914.75	7.289E-04
40.02	0.2038	218946.75	1.021E-03
45.00	0.2241	218975.25	1.282E-03
50.00	0.2434	219009.50	1.595E-03
54.98	0.2606	219038.75	1.862E-03
59.99	0.2768	219072.75	2.173E-03
64.99	0.2923	219115.50	2.564E-03
70.00	0.3069	219144.00	2.824E-03
71.98	0.3120	219157.00	2.943E-03

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	219198.25	0.000E+00
4.99	0.0381	219200.75	2.281E-05
9.98	0.0750	219203.25	4.562E-05
15.00	0.1107	219211.75	1.232E-04
19.99	0.1442	219235.50	3.399E-04
25.02	0.1751	219267.00	6.273E-04
29.96	0.2045	219303.50	9.603E-04
34.99	0.2302	219343.50	1.325E-03
39.97	0.2548	219379.50	1.654E-03
45.00	0.2771	219425.00	2.069E-03
50.03	0.2972	219467.50	2.457E-03
55.00	0.3154	219518.50	2.922E-03
59.99	0.3315	219567.25	3.367E-03
65.00	0.3461	219613.75	3.791E-03
69.98	0.3600	219659.00	4.204E-03
71.98	0.3655	219682.75	4.421E-03

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	219562.25	0.000E+00
4.99	0.0513	219552.25	-9.109E-05
10.00	0.1001	219572.75	9.564E-05
15.01	0.1444	219600.50	3.484E-04
20.00	0.1846	219652.25	8.198E-04
25.00	0.2207	219713.50	1.378E-03
30.01	0.2541	219776.25	1.949E-03
35.03	0.2822	219843.75	2.564E-03
40.01	0.3087	219914.75	3.211E-03
45.00	0.3314	219984.50	3.846E-03
49.98	0.3513	220051.50	4.457E-03
55.01	0.3702	220107.50	4.967E-03
59.97	0.3853	220166.75	5.506E-03
65.00	0.3989	220224.00	6.028E-03
70.01	0.4122	220281.75	6.554E-03
72.04	0.4165	220303.75	6.754E-03

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	219963.00	0.000E+00
5.00	0.0900	219981.25	1.659E-04
9.98	0.1648	220047.75	7.706E-04
15.00	0.2257	220129.50	1.514E-03
20.02	0.2737	220233.00	2.455E-03
25.01	0.3098	220335.50	3.387E-03
30.03	0.3418	220447.00	4.401E-03
34.99	0.3678	220542.25	5.267E-03
40.02	0.3896	220643.50	6.096E-03
45.01	0.4084	220715.75	6.844E-03
50.00	0.4246	220793.50	7.551E-03
54.98	0.4387	220861.75	8.172E-03
60.01	0.4517	220933.25	8.822E-03
64.99	0.4650	221000.00	9.429E-03
70.00	0.4728	221065.50	1.002E-02
72.04	0.4771	221091.50	1.026E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	221103.75	0.000E+00
5.02	0.1685	221082.50	-1.922E-04
9.98	0.2773	221247.25	1.298E-03
14.99	0.3447	221411.25	2.781E-03
19.99	0.3901	221534.25	3.891E-03
24.98	0.4207	221653.25	4.971E-03
30.00	0.4464	221756.25	5.902E-03
34.99	0.4664	221853.50	6.782E-03
39.98	0.4838	221944.75	7.607E-03
45.01	0.4979	222027.00	8.351E-03
50.03	0.5093	222101.25	9.023E-03
54.98	0.5197	222162.50	9.577E-03
60.00	0.5289	222235.00	1.023E-02
65.02	0.5365	222292.75	1.076E-02
70.01	0.5434	222348.00	1.125E-02
72.07	0.5451	222367.25	1.143E-02

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	220224.75	0.000E+00
5.02	0.1201	220268.25	3.951E-04
10.01	0.2106	220391.00	1.510E-03
15.00	0.2765	220500.25	2.502E-03
20.02	0.3250	220616.75	3.569E-03
25.01	0.3598	220749.00	4.761E-03
30.00	0.3873	220856.25	5.735E-03
35.03	0.4113	220951.75	6.602E-03
39.98	0.4309	221054.00	7.531E-03
45.00	0.4471	221131.00	8.230E-03
50.00	0.4609	221205.50	8.907E-03
55.00	0.4735	221280.50	9.588E-03
60.01	0.4849	221355.00	1.026E-02
64.98	0.4942	221423.00	1.088E-02
70.02	0.5033	221487.00	1.146E-02
72.04	0.5049	221514.50	1.171E-02

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	221271.50	0.000E+00
5.03	0.3457	221581.00	2.797E-03
10.00	0.4025	221768.25	4.490E-03
14.92	0.4363	221912.50	5.794E-03
19.98	0.4636	222040.00	6.946E-03
25.01	0.4845	222140.75	7.857E-03
29.99	0.5014	222245.25	8.801E-03
35.02	0.5158	222345.75	9.710E-03
40.00	0.5284	222424.25	1.042E-02
44.99	0.5369	222506.75	1.117E-02
50.02	0.5478	222568.00	1.172E-02
54.95	0.5560	222638.00	1.235E-02
60.00	0.5634	222689.75	1.282E-02
64.98	0.5699	222747.50	1.334E-02
69.98	0.5763	222799.50	1.381E-02
72.11	0.5778	222819.75	1.399E-02

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	220622.50	0.000E+00
5.02	0.1701	220632.75	9.292E-05
10.00	0.2671	220806.00	1.663E-03
15.00	0.3275	220912.50	2.901E-03
20.02	0.3673	221077.00	4.129E-03
25.01	0.3959	221195.50	5.194E-03
30.00	0.4196	221313.50	6.264E-03
35.00	0.4400	221409.25	7.132E-03
40.00	0.4572	221504.50	7.996E-03
45.00	0.4721	221599.25	8.764E-03
49.99	0.4843	221655.00	9.360E-03
54.98	0.4947	221750.25	1.022E-02
59.99	0.5054	221821.75	1.087E-02
65.00	0.5149	221884.25	1.144E-02
69.98	0.5221	221938.25	1.193E-02
72.04	0.5252	221963.00	1.215E-02

TEMPERATURA = 215.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	221730.50	0.000E+00
2.80	0.2954	221832.00	9.155E-04
5.00	0.3956	222056.50	2.941E-03
10.01	0.4498	222264.00	4.812E-03
14.99	0.4795	222390.50	5.953E-03
20.00	0.5007	222508.00	7.013E-03
25.00	0.5181	222627.50	8.091E-03
29.99	0.5335	222725.50	8.975E-03
35.02	0.5460	222817.50	9.805E-03
39.98	0.5558	222895.50	1.051E-02
45.03	0.5653	222965.50	1.114E-02
49.98	0.5748	223026.00	1.169E-02
55.00	0.5825	223087.50	1.224E-02
60.01	0.5898	223147.50	1.278E-02
64.98	0.5960	223201.00	1.326E-02
72.04	0.6033	223270.00	1.389E-02
70.00	0.6018	223227.00	1.350E-02

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	222213.00	0.000E+00
3.84	0.3946	222474.25	2.351E-03
4.99	0.4506	222502.25	3.143E-03
9.98	0.5001	222757.75	4.993E-03
14.97	0.5234	222879.25	5.915E-03
20.00	0.5402	222979.25	6.897E-03
24.94	0.5540	223079.75	7.801E-03
30.01	0.5657	223169.75	8.611E-03
35.00	0.5749	223241.25	9.255E-03
40.00	0.5847	223317.00	9.936E-03
45.00	0.5917	223385.25	1.055E-02
50.02	0.5998	223454.00	1.117E-02
54.98	0.6052	223506.50	1.164E-02
59.99	0.6105	223565.50	1.217E-02
64.99	0.6158	223615.25	1.262E-02
69.98	0.6211	223668.25	1.310E-02
72.04	0.6244	223687.50	1.327E-02

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	225251.50	0.000E+00
5.00	0.5370	225619.25	3.185E-03
9.97	0.6641	225852.00	5.332E-03
14.99	0.6829	225926.75	5.996E-03
20.03	0.6928	225981.25	6.479E-03
25.01	0.6989	226035.00	6.957E-03
30.00	0.7038	226103.75	7.567E-03
35.05	0.7087	226139.50	7.885E-03
39.98	0.7122	226195.75	8.384E-03
45.01	0.7161	226236.75	8.748E-03
49.99	0.7203	226289.00	9.212E-03
54.98	0.7238	226324.00	9.523E-03
60.01	0.7259	226352.50	9.776E-03
65.00	0.7287	226389.25	1.010E-02
70.00	0.7320	226419.75	1.037E-02
72.04	0.7324	226442.25	1.057E-02

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	223347.50	0.000E+00
2.80	0.3217	223429.75	7.365E-04
5.00	0.5024	223591.50	2.185E-03
10.00	0.5622	223916.50	4.290E-03
15.03	0.5807	223920.75	5.133E-03
20.00	0.5938	223998.25	5.827E-03
25.00	0.6049	224035.75	6.611E-03
30.01	0.6143	224160.25	7.278E-03
35.00	0.6229	224240.25	7.994E-03
40.02	0.6303	224312.00	8.637E-03
45.00	0.6364	224370.25	9.158E-03
49.99	0.6430	224429.00	9.684E-03
55.00	0.6487	224485.50	1.019E-02
60.00	0.6532	224534.25	1.063E-02
64.95	0.6581	224587.75	1.111E-02
70.01	0.6626	224632.00	1.150E-02
72.02	0.6639	224650.50	1.167E-02

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	226068.00	0.000E+00
4.98	0.5310	226459.00	3.459E-03
9.98	0.6868	226753.50	6.005E-03
15.00	0.7051	226821.25	6.661E-03
19.98	0.7145	226876.75	7.155E-03
25.01	0.7219	226932.50	7.648E-03
30.00	0.7272	226976.50	8.037E-03
35.03	0.7317	227031.25	8.522E-03
39.97	0.7345	227063.00	8.803E-03
45.01	0.7386	227090.75	9.048E-03
50.00	0.7419	227140.00	9.484E-03
55.00	0.7439	227190.75	9.841E-03
59.99	0.7476	227213.25	1.013E-02
65.00	0.7500	227236.00	1.033E-02
69.98	0.7527	227258.25	1.053E-02
72.04	0.7537	227271.50	1.065E-02

TEMPERATURA = 150.0 K

TEMPERATURA = 190.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	224356.00	0.000E+00
5.00	0.5230	224611.50	2.278E-03
10.02	0.6258	224843.75	4.348E-03
14.99	0.6426	224926.50	5.086E-03
19.99	0.6528	225002.50	5.763E-03
24.98	0.6605	225066.75	6.336E-03
30.00	0.6666	225142.25	7.009E-03
35.00	0.6723	225202.25	7.541E-03
40.00	0.6776	225254.75	8.012E-03
45.03	0.6821	225306.00	8.469E-03
50.00	0.6862	225357.50	8.928E-03
55.00	0.6903	225394.50	9.258E-03
60.00	0.6935	225439.25	9.657E-03
65.02	0.6960	225485.75	1.007E-02
70.00	0.6997	225523.25	1.041E-02
72.02	0.7009	225537.50	1.053E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	227486.50	0.000E+00
5.00	0.5419	227931.50	3.912E-03
10.01	0.7522	228430.25	8.297E-03
15.03	0.7734	228496.25	8.877E-03
20.00	0.7829	228517.75	9.330E-03
25.00	0.7865	228580.75	9.620E-03
30.03	0.7910	228618.50	9.952E-03
35.00	0.7934	228658.75	1.031E-02
40.00	0.7959	228698.75	1.057E-02
45.01	0.7979	228727.25	1.091E-02
49.98	0.8003	228745.00	1.106E-02
54.95	0.8018	228755.50	1.116E-02
60.00	0.8040	228764.00	1.123E-02
64.99	0.8054	228777.00	1.135E-02
70.00	0.8061	228804.25	1.159E-02
72.04	0.8069	228823.00	1.175E-02

TEMPERATURA = 130.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	221954.50	0.000E+00
5.00	0.5437	222339.75	3.471E-03
10.01	0.7933	222833.75	7.923E-03
15.01	0.8217	222960.50	8.343E-03
20.00	0.8306	222916.50	8.668E-03
25.02	0.8343	222955.50	9.020E-03
30.01	0.8378	222988.00	9.313E-03
34.99	0.8403	223008.00	9.493E-03
39.98	0.8431	223035.00	9.736E-03
45.01	0.8442	223057.00	9.934E-03
50.02	0.8458	223075.00	1.010E-02
55.00	0.8477	223086.50	1.020E-02
60.03	0.8485	223106.25	1.038E-02
64.59	0.8500	223119.50	1.050E-02
70.02	0.8512	223133.00	1.062E-02
72.04	0.8513	223140.00	1.068E-02

TEMPERATURA = 110.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	223134.00	0.000E+00
5.00	0.5506	223510.00	3.370E-03
9.98	0.8303	224181.25	9.387E-03
15.03	0.8610	224238.00	9.895E-03
20.00	0.8748	224262.00	1.011E-02
25.00	0.8783	224298.25	1.044E-02
30.01	0.8808	224318.00	1.061E-02
35.02	0.8826	224350.00	1.090E-02
40.00	0.8846	224361.00	1.100E-02
45.03	0.8859	224383.00	1.120E-02
50.00	0.8872	224409.00	1.143E-02
55.00	0.8888	224425.00	1.157E-02
59.97	0.8891	224438.50	1.169E-02
64.99	0.8912	224454.50	1.184E-02
70.00	0.8921	224499.00	1.223E-02
72.04	0.8923	224504.50	1.228E-02

TEMPERATURA = 90.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	224160.75	0.000E+00
5.02	0.5478	224511.25	3.127E-03
9.97	0.8629	225294.75	1.012E-02
15.03	0.9047	225418.25	1.122E-02
20.02	0.9177	225445.00	1.146E-02
24.95	0.9211	225490.00	1.186E-02
30.04	0.9231	225518.50	1.211E-02
35.00	0.9243	225548.25	1.238E-02
39.97	0.9260	225568.50	1.256E-02
44.99	0.9272	225580.25	1.267E-02
50.02	0.9286	225601.50	1.285E-02
54.97	0.9297	225601.75	1.286E-02
64.99	0.9321	225608.50	1.292E-02
72.05	0.9330	225622.50	1.304E-02

TEMPERATURA = 70.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	225130.50	0.000E+00
5.02	0.5490	225402.75	1.974E-03
9.97	0.8865	226296.50	9.912E-03
15.00	0.9329	226495.25	1.165E-02
20.02	0.9477	226522.25	1.192E-02
24.98	0.9514	226536.75	1.205E-02
35.00	0.9534	226567.75	1.232E-02
45.01	0.9552	226586.50	1.249E-02
55.00	0.9566	226617.00	1.276E-02
64.99	0.9573	226632.25	1.289E-02
72.04	0.9576	226627.25	1.285E-02

TEMPERATURA = 50.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	225757.25	0.000E+00
3.54	0.4092	225775.50	1.617E-04
5.03	0.5595	225915.75	1.404E-03
9.98	0.9044	226530.75	6.852E-03
14.97	0.9534	226569.00	7.191E-03
20.00	0.9685	226585.00	7.333E-03
30.00	0.9742	226592.50	7.409E-03
40.00	0.9746	226622.00	7.661E-03
50.00	0.9748	226652.00	7.927E-03
60.05	0.9748	226661.50	8.011E-03
72.04	0.9748	226664.50	8.037E-03

TEMPERATURA = 30.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	226457.50	0.000E+00
5.00	0.5618	226618.50	1.687E-03
10.00	0.9201	227262.50	7.110E-03
14.97	0.9710	227271.50	7.189E-03
20.02	0.9877	227265.50	7.136E-03
25.00	0.9922	227244.00	6.946E-03
29.99	0.9934	227246.00	6.964E-03
40.01	0.9934	227243.00	6.937E-03
50.03	0.9934	227269.25	7.169E-03
60.01	0.9934	227279.50	7.260E-03
64.99	0.9934	227284.00	7.299E-03
72.04	0.9934	227276.00	7.229E-03

C_{1313} (\vec{k}/\vec{c} , \vec{p}/\vec{a}), \vec{h}/\vec{c} :

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	218268.00	0.000E+00
5.02	0.0109	218263.50	-4.123E-05
10.00	0.0199	218260.75	-6.643E-05
15.00	0.0300	218254.25	-1.260E-04
20.00	0.0402	218248.25	-1.810E-04
25.00	0.0502	218241.00	-2.474E-04
30.01	0.0598	218233.00	-3.207E-04
35.02	0.0700	218222.75	-4.146E-04
40.01	0.0801	218211.25	-5.200E-04
45.01	0.0896	218200.00	-6.231E-04
50.00	0.0999	218186.75	-7.445E-04
54.98	0.1084	218174.50	-8.567E-04
60.00	0.1176	218159.00	-9.988E-04
65.00	0.1266	218153.75	-1.047E-03
69.98	0.1359	218142.25	-1.152E-03
72.07	0.1396	218137.75	-1.193E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	219142.25	0.000E+00
5.00	0.0132	219141.50	-6.845E-06
9.98	0.0266	219137.50	-4.335E-05
15.00	0.0399	219129.50	-1.161E-04
20.02	0.0532	219117.50	-2.259E-04
25.01	0.0660	219103.00	-3.582E-04
30.03	0.0789	219084.00	-5.316E-04
35.02	0.0917	219065.00	-7.050E-04
40.00	0.1041	219040.50	-9.246E-04
45.00	0.1164	219016.75	-1.145E-03
50.05	0.1282	219002.00	-1.280E-03
55.00	0.1401	218983.25	-1.451E-03
60.00	0.1511	218957.50	-1.686E-03
65.02	0.1624	218934.25	-1.898E-03
70.00	0.1737	218910.00	-2.120E-03
72.08	0.1771	218902.25	-2.190E-03

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	218520.75	0.000E+00
5.00	0.0104	218519.50	-1.144E-05
10.00	0.0213	218520.50	-2.298E-06
15.00	0.0320	218511.25	-8.695E-05
20.02	0.0425	218504.25	-1.144E-04
25.01	0.0528	218498.75	-2.014E-04
30.00	0.0632	218494.00	-2.448E-04
35.03	0.0732	218486.75	-3.112E-04
40.01	0.0835	218481.25	-3.815E-04
45.00	0.0934	218471.00	-4.553E-04
50.02	0.1032	218461.50	-5.423E-04
54.98	0.1129	218451.75	-6.315E-04
60.00	0.1221	218434.25	-7.917E-04
65.03	0.1317	218418.50	-9.358E-04
70.00	0.1406	218401.00	-1.096E-03
72.08	0.1435	218393.75	-1.162E-03

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	219589.25	0.000E+00
4.99	0.0163	219580.00	-8.425E-05
10.00	0.0311	219569.00	-1.844E-04
15.00	0.0471	219556.50	-2.983E-04
20.02	0.0620	219532.50	-5.169E-04
25.00	0.0768	219510.00	-7.218E-04
30.00	0.0913	219482.50	-9.723E-04
35.00	0.1054	219453.50	-1.236E-03
40.00	0.1190	219420.25	-1.539E-03
45.00	0.1325	219380.50	-1.901E-03
50.00	0.1454	219342.75	-2.245E-03
55.00	0.1581	219307.75	-2.564E-03
60.00	0.1703	219275.50	-2.858E-03
64.99	0.1819	219231.00	-3.263E-03
69.98	0.1932	219185.50	-3.677E-03
72.08	0.1984	219165.00	-3.864E-03

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	218823.00	0.000E+00
5.02	0.0121	218823.25	2.285E-06
10.01	0.0239	218821.25	-1.599E-05
15.00	0.0354	218817.50	-5.027E-05
20.02	0.0471	218809.75	-1.211E-04
24.97	0.0585	218805.75	-1.577E-04
30.00	0.0698	218800.50	-2.056E-04
35.03	0.0811	218791.00	-2.925E-04
40.01	0.0921	218774.00	-4.479E-04
45.01	0.1031	218757.50	-5.987E-04
50.00	0.1137	218736.75	-7.883E-04
55.01	0.1242	218716.75	-9.711E-04
60.00	0.1343	218694.00	-1.179E-03
65.02	0.1446	218682.00	-1.289E-03
70.00	0.1546	218672.00	-1.380E-03
72.08	0.1582	218662.75	-1.465E-03

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	219965.75	0.000E+00
4.99	0.0165	219965.50	-2.273E-06
10.00	0.0323	219949.25	-1.500E-04
15.00	0.0478	219925.75	-3.637E-04
20.02	0.0632	219887.00	-7.160E-04
25.00	0.0787	219835.00	-1.189E-03
30.00	0.0940	219777.75	-1.709E-03
35.02	0.1085	219715.00	-2.280E-03
40.00	0.1228	219650.00	-2.871E-03
44.99	0.1369	219577.00	-3.535E-03
50.02	0.1504	219498.00	-4.253E-03
55.00	0.1635	219421.50	-4.948E-03
60.00	0.1761	219348.00	-5.617E-03
65.00	0.1885	219289.50	-6.149E-03
70.00	0.1998	219236.00	-6.635E-03
72.08	0.2045	219220.00	-6.781E-03

TEMPERATURA = 240.0 K

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	220391.00	0.000E+00
5.02	0.0183	220381.50	-8.621E-05
10.01	0.0360	220331.25	-5.422E-04
15.00	0.0541	220252.75	-1.255E-03
20.02	0.0716	220113.50	-2.216E-03
25.00	0.0886	220011.00	-3.449E-03
30.00	0.1060	219850.25	-4.907E-03
35.02	0.1223	219686.50	-6.393E-03
40.00	0.1388	219533.25	-7.784E-03
45.01	0.1542	219394.00	-9.048E-03
50.00	0.1693	219259.50	-1.027E-02
55.00	0.1839	219131.00	-1.143E-02
60.00	0.1979	219019.75	-1.244E-02
64.99	0.2115	218917.50	-1.337E-02
70.00	0.2250	218817.00	-1.428E-02
72.08	0.2307	218785.25	-1.457E-02

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	216128.00	0.000E+00
5.00	0.0225	216021.00	-9.902E-04
10.01	0.0449	215667.00	-4.266E-03
15.01	0.0667	214798.25	-1.314E-02
20.03	0.0891	214298.25	-1.693E-02
25.01	0.1113	214331.75	-1.862E-02
30.00	0.1322	214319.50	-1.674E-02
40.02	0.1721	214313.25	-1.679E-02
49.99	0.2088	214237.25	-1.750E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	216470.50	0.000E+00
2.50	0.0110	216446.00	-2.264E-04
4.99	0.0216	216378.00	-8.546E-04
7.50	0.0323	216258.00	-1.963E-03
10.01	0.0426	216057.25	-3.818E-03
12.53	0.0538	215374.50	-1.013E-02

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	213457.25	0.000E+00
5.02	0.0200	213394.25	-5.903E-04
10.00	0.0390	213216.25	-2.258E-03
15.01	0.0585	212936.50	-4.879E-03
20.02	0.0769	212580.75	-8.212E-03
25.01	0.0954	212245.25	-1.136E-02
30.00	0.1135	211926.50	-1.434E-02
35.00	0.1311	211629.50	-1.713E-02
40.00	0.1482	211347.50	-1.977E-02
45.00	0.1653	211166.75	-2.146E-02
50.03	0.1825	211045.75	-2.259E-02
55.00	0.1997	210940.75	-2.358E-02
60.00	0.2163	210844.25	-2.448E-02
65.03	0.2317	210775.25	-2.513E-02
70.01	0.2475	210736.25	-2.549E-02
72.07	0.2540	210727.00	-2.558E-02

 $C_{2121} (\vec{k}/\vec{a}, \vec{p}/\vec{b}), \vec{h}/\vec{a}:$

TEMPERATURA = 300.0 K

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	158583.00	0.000E+00
5.00	0.0165	158582.50	-6.306E-06
10.00	0.0323	158582.25	-9.459E-06
15.01	0.0484	158583.50	6.306E-06
20.00	0.0644	158585.25	2.838E-05
25.00	0.0800	158587.00	5.045E-05
30.01	0.0954	158588.25	6.621E-05
35.00	0.1106	158594.25	1.419E-04
40.00	0.1252	158599.25	2.049E-04
45.00	0.1394	158604.75	2.743E-04
50.00	0.1533	158612.50	3.720E-04
55.01	0.1667	158618.75	4.509E-04
60.00	0.1794	158631.75	6.148E-04
65.03	0.1918	158641.75	7.409E-04
70.00	0.2037	158655.75	9.175E-04
72.05	0.2089	158659.75	9.679E-04

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	158793.75	0.000E+00
5.03	0.0182	158794.75	1.259E-05
10.01	0.0360	158794.75	1.259E-05
15.00	0.0536	158795.25	1.889E-05
20.00	0.0713	158796.00	2.834E-05
25.01	0.0884	158799.50	7.242E-05
30.00	0.1058	158803.50	1.228E-04
35.03	0.1227	158808.00	1.795E-04
40.00	0.1399	158814.50	2.613E-04
45.01	0.1559	158820.00	3.306E-04
50.02	0.1711	158828.50	4.377E-04
54.98	0.1859	158841.00	5.951E-04
60.00	0.2002	158853.25	7.494E-04
65.02	0.2137	158869.00	9.478E-04
70.00	0.2270	158885.25	1.152E-03
72.05	0.2319	158892.50	1.244E-03

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159031.25	0.000E+00
4.99	0.0230	159032.50	1.572E-05
10.00	0.0455	159033.00	2.201E-05
14.99	0.0680	159034.25	3.773E-05
20.00	0.0905	159035.00	4.716E-05
25.01	0.1121	159037.50	7.860E-05
30.01	0.1328	159038.00	1.478E-04
35.00	0.1523	159051.00	2.484E-04
40.00	0.1715	159059.00	3.490E-04
45.01	0.1892	159069.25	4.779E-04
50.00	0.2066	159082.75	6.477E-04
55.00	0.2225	159097.75	8.363E-04
60.00	0.2374	159116.75	1.075E-03
65.03	0.2523	159138.00	1.343E-03
70.02	0.2660	159158.25	1.597E-03
72.05	0.2720	159165.25	1.685E-03

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159766.00	0.000E+00
4.99	0.0513	159761.50	-5.633E-05
10.01	0.1001	159744.75	-2.660E-04
15.00	0.1444	159728.75	-4.663E-04
19.99	0.1846	159728.50	-4.691E-04
25.01	0.2267	159739.25	-4.475E-04
30.01	0.2541	159747.75	-2.285E-04
35.00	0.2822	159778.00	1.502E-04
40.02	0.3087	159814.75	6.103E-04
45.01	0.3314	159855.00	1.114E-03
50.00	0.3513	159898.25	1.656E-03
55.00	0.3702	159945.50	2.247E-03
59.97	0.3853	159991.75	2.823E-03
65.00	0.3989	160040.50	3.439E-03
69.98	0.4122	160092.50	4.087E-03
72.08	0.4165	160114.25	4.350E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159259.00	0.000E+00
4.99	0.0279	159260.50	1.884E-05
10.00	0.0557	159260.50	1.894E-05
15.00	0.0828	159260.25	1.570E-05
20.00	0.1094	159261.50	3.140E-05
25.01	0.1354	159263.75	5.965E-05
30.00	0.1596	159266.50	9.419E-05
35.00	0.1825	159275.00	2.009E-04
40.01	0.2038	159283.00	3.642E-04
45.01	0.2241	159302.00	5.400E-04
50.00	0.2434	159321.00	7.786E-04
55.01	0.2606	159343.25	1.058E-03
60.00	0.2768	159369.50	1.375E-03
64.99	0.2923	159397.25	1.736E-03
70.02	0.3069	159427.75	2.119E-03
72.05	0.3120	159439.75	2.270E-03

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	160191.75	0.000E+00
4.99	0.0900	160060.25	-5.184E-04
7.50	0.1289	160029.50	-9.026E-04
10.00	0.1648	160003.75	-1.224E-03
12.50	0.1964	159988.75	-1.112E-03
15.00	0.2257	159984.00	-1.471E-03
17.51	0.2504	159988.25	-1.118E-03
20.02	0.2737	159997.75	-1.299E-03
22.50	0.2926	160011.50	-1.127E-03
24.98	0.3098	160028.75	-9.119E-04
30.01	0.3418	160071.25	-3.810E-04
35.00	0.3678	160122.00	2.530E-04
40.00	0.3896	160175.25	9.182E-04
45.01	0.4084	160233.25	1.643E-03
50.02	0.4246	160291.75	2.373E-03
55.00	0.4387	160350.50	3.197E-03
60.00	0.4517	160408.75	3.835E-03
65.00	0.4626	160471.00	4.613E-03
70.01	0.4731	160531.25	5.365E-03
72.07	0.4771	160555.50	5.668E-03

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159512.00	0.000E+00
5.00	0.0381	159510.25	-2.194E-05
10.00	0.0750	159504.75	-9.090E-05
15.00	0.1107	159499.50	-1.567E-04
20.00	0.1442	159498.50	-1.693E-04
25.00	0.1751	159499.25	-1.599E-04
30.00	0.2045	159501.50	-1.317E-04
35.00	0.2302	159516.50	5.642E-05
40.00	0.2548	159539.00	3.385E-04
45.03	0.2771	159563.00	6.395E-04
50.03	0.2972	159592.25	1.006E-03
55.02	0.3154	159629.25	1.470E-03
60.01	0.3315	159664.50	1.912E-03
65.03	0.3461	159702.75	2.392E-03
70.01	0.3600	159742.50	2.890E-03
72.08	0.3655	159762.00	3.135E-03

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	160259.50	0.000E+00
2.50	0.0634	160230.00	-3.682E-04
5.00	0.1291	160164.75	-1.102E-03
7.51	0.1684	160121.50	-1.722E-03
10.00	0.2106	160098.75	-2.006E-03
12.52	0.2459	160095.75	-2.044E-03
15.01	0.2765	160099.25	-2.000E-03
17.51	0.3028	160110.50	-1.859E-03
20.00	0.3250	160128.25	-1.638E-03
25.00	0.3598	160173.00	-1.079E-03
30.01	0.3873	160226.25	-4.150E-04
35.00	0.4113	160283.50	2.995E-04
40.00	0.4309	160317.25	1.095E-03
45.00	0.4471	160410.00	1.878E-03
50.02	0.4609	160476.25	2.705E-03
55.00	0.4731	160514.25	3.554E-03
60.01	0.4843	160611.00	4.387E-03
65.00	0.4940	160671.75	5.145E-03
70.00	0.5024	160740.00	5.997E-03
72.05	0.5045	160753.50	6.290E-03

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	161011.00	0.000E+00
2.48	0.0919	160823.50	-2.329E-03
3.65	0.1302	160572.75	-5.444E-03
4.99	0.1685	160450.50	-6.962E-03
7.51	0.2302	160398.50	-7.608E-03
10.01	0.2773	160399.00	-7.602E-03
12.50	0.3138	160415.25	-7.400E-03
14.99	0.3447	160438.25	-7.114E-03
20.00	0.3901	160498.00	-6.372E-03
25.00	0.4207	160562.50	-5.571E-03
30.01	0.4464	160633.50	-4.689E-03
35.02	0.4664	160700.50	-3.857E-03
39.98	0.4838	160745.25	-3.301E-03
45.00	0.4979	160759.50	-3.124E-03
50.02	0.5093	160830.25	-2.245E-03
55.01	0.5197	160900.50	-1.373E-03
59.99	0.5289	160971.25	-4.938E-04
65.00	0.5365	161038.25	3.385E-04
70.00	0.5434	161103.25	1.146E-03
72.07	0.5451	161128.50	1.460E-03

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	160596.50	0.000E+00
2.51	0.0959	160430.75	-2.064E-03
5.03	0.1701	160294.00	-3.767E-03
7.50	0.2219	160250.75	-4.306E-03
10.01	0.2671	160239.00	-4.452E-03
12.52	0.3004	160244.25	-4.387E-03
15.00	0.3275	160258.75	-4.206E-03
19.99	0.3673	160305.50	-3.624E-03
25.00	0.3959	160363.50	-2.902E-03
30.00	0.4196	160429.75	-2.077E-03
35.02	0.4400	160492.00	-1.301E-03
40.00	0.4572	160562.25	-4.265E-04
45.01	0.4721	160629.25	4.072E-04
50.02	0.4843	160698.75	1.273E-03
55.00	0.4947	160764.50	2.002E-03
60.00	0.5054	160833.00	2.945E-03
65.00	0.5149	160898.50	3.761E-03
70.00	0.5221	160960.75	4.536E-03
72.07	0.5252	160988.50	4.882E-03

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	161173.00	0.000E+00
2.52	0.2527	161049.50	-1.533E-03
3.69	0.3182	160893.50	-3.468E-03
5.02	0.3457	160675.75	-6.170E-03
7.50	0.3800	160604.25	-7.058E-03
10.01	0.4025	160604.50	-7.055E-03
12.50	0.4214	160624.50	-6.806E-03
14.99	0.4363	160650.50	-6.434E-03
20.00	0.4636	160716.00	-5.671E-03
24.98	0.4845	160786.00	-4.802E-03
30.03	0.5014	160849.50	-4.014E-03
34.99	0.5158	160939.00	-2.994E-03
40.00	0.5284	161018.75	-1.914E-03
45.00	0.5389	161097.25	-9.400E-04
50.00	0.5478	161171.50	-1.861E-05
55.00	0.5560	161246.75	9.152E-04
60.03	0.5634	161316.75	1.784E-03
65.03	0.5699	161379.50	2.562E-03
70.00	0.5763	161443.25	3.354E-03
72.07	0.5778	161467.50	3.654E-03

TEMPERATURA = 215.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161398.75	0.000E+00
2.50	0.2720	161314.50	-1.044E-03
3.96	0.3703	161105.75	-2.887E-03
4.99	0.3956	160905.50	-5.369E-03
6.46	0.4156	160859.75	-6.679E-03
7.53	0.4282	160839.25	-6.933E-03
10.00	0.4498	160832.75	-7.014E-03
12.50	0.4662	160856.50	-6.719E-03
15.00	0.4795	160890.75	-6.295E-03
20.00	0.5007	160961.50	-5.418E-03
25.01	0.5181	161044.50	-4.390E-03
30.00	0.5335	161121.75	-3.432E-03
35.02	0.5460	161199.00	-2.475E-03
39.98	0.5558	161277.25	-1.506E-03
45.01	0.5653	161354.50	-5.438E-04
50.02	0.5748	161428.00	3.625E-04
55.00	0.5825	161495.50	1.199E-03
60.00	0.5898	161562.25	2.026E-03
65.03	0.5960	161628.00	2.841E-03
70.00	0.6018	161693.50	3.652E-03
72.07	0.6033	161715.50	3.925E-03

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	158004.00	0.000E+00
2.50	0.2925	157959.25	-5.664E-04
4.99	0.5024	157821.00	-2.316E-03
7.53	0.5449	157679.00	-4.114E-03
10.01	0.5622	157865.50	-1.753E-03
12.52	0.5721	158060.00	7.988E-04
15.00	0.5807	158145.00	1.785E-03
20.02	0.5938	158257.00	3.202E-03
25.01	0.6049	158352.25	4.408E-03
30.01	0.6143	158439.50	5.513E-03
35.03	0.6229	158521.00	6.544E-03
39.97	0.6303	158590.00	7.418E-03
45.01	0.6364	158676.00	8.506E-03
50.02	0.6430	158746.00	9.392E-03
55.00	0.6487	158813.50	1.025E-02
60.01	0.6532	158880.00	1.109E-02
65.02	0.6581	158937.00	1.181E-02
70.00	0.6626	158997.50	1.258E-02
72.07	0.6639	159021.50	1.288E-02

TEMPERATURA = 190.0 K

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162942.00	0.000E+00
2.50	0.2805	162869.25	-8.930E-04
4.09	0.4134	162712.00	-2.823E-03
5.00	0.4506	162565.75	-4.618E-03
6.68	0.4767	162388.75	-6.791E-03
7.53	0.4840	162376.50	-6.941E-03
10.00	0.5001	162362.25	-7.116E-03
12.50	0.5125	162382.00	-6.874E-03
15.00	0.5234	162413.50	-6.487E-03
19.99	0.5402	162490.00	-5.518E-03
25.00	0.5540	162566.25	-4.612E-03
30.01	0.5657	162644.50	-3.652E-03
35.00	0.5749	162718.75	-2.740E-03
40.01	0.5847	162794.50	-1.810E-03
45.00	0.5917	162867.25	-9.175E-04
50.02	0.5998	162939.50	-3.069E-05
54.98	0.6052	163011.00	8.469E-04
60.00	0.6105	163081.25	1.709E-03
65.02	0.6158	163147.50	2.522E-03
70.00	0.6211	163217.50	3.382E-03
72.07	0.6244	163248.00	3.756E-03

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162649.00	0.000E+00
2.51	0.2860	162602.25	-5.749E-04
5.00	0.5230	162389.25	-3.194E-03
6.64	0.5946	162133.00	-6.345E-03
7.53	0.6068	162078.50	-7.015E-03
10.00	0.6258	162033.00	-7.575E-03
12.50	0.6362	162007.50	-7.988E-03
14.99	0.6426	162012.50	-7.827E-03
20.02	0.6528	162065.00	-7.181E-03
25.01	0.6605	162122.25	-6.477E-03
30.01	0.6666	162185.50	-5.699E-03
35.02	0.6723	162255.50	-4.839E-03
40.00	0.6776	162315.00	-4.107E-03
45.03	0.6821	162381.50	-3.289E-03
50.00	0.6862	162441.00	-2.558E-03
55.00	0.6903	162503.75	-1.786E-03
60.00	0.6935	162567.00	-1.008E-03
64.99	0.6960	162620.00	-3.566E-04
70.00	0.6997	162677.50	3.504E-04
72.05	0.7009	162705.75	6.978E-04

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	163177.75	0.000E+00
2.50	0.2927	163138.50	-4.811E-04
5.00	0.5370	162905.50	-3.337E-03
7.53	0.6447	162557.50	-7.602E-03
10.00	0.6641	162466.75	-8.714E-03
12.52	0.6744	162412.50	-9.379E-03
14.99	0.6829	162414.25	-9.358E-03
20.00	0.6928	162467.25	-8.708E-03
25.00	0.6989	162525.50	-7.994E-03
30.01	0.7036	162592.50	-7.173E-03
35.02	0.7087	162658.75	-6.361E-03
40.00	0.7122	162723.00	-5.574E-03
45.00	0.7161	162780.50	-4.869E-03
50.00	0.7203	162841.50	-4.085E-03
55.02	0.7238	162903.50	-3.361E-03
60.01	0.7259	162959.00	-2.681E-03
65.02	0.7287	163021.50	-1.915E-03
70.01	0.7320	163073.75	-1.275E-03
72.07	0.7324	163092.50	-1.045E-03

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	163683.50	0.000E+00
2.50	0.2806	163658.50	-3.055E-04
5.02	0.5310	163404.50	-3.409E-03
7.49	0.6598	163040.50	-7.857E-03
10.00	0.6868	162903.50	-9.531E-03
14.99	0.7054	162352.50	-1.015E-02
20.00	0.7145	162906.00	-9.500E-03
25.01	0.7219	162965.50	-8.773E-03
30.01	0.7272	163025.00	-8.046E-03
33.65	0.7306	163068.75	-7.511E-03
35.00	0.7317	163095.50	-7.307E-03
40.00	0.7345	163144.00	-6.592E-03
45.01	0.7386	163202.00	-5.883E-03
50.02	0.7419	163257.00	-5.211E-03
55.00	0.7439	163311.50	-4.545E-03
60.00	0.7476	163358.50	-3.971E-03
64.99	0.7500	163403.25	-3.424E-03
70.00	0.7527	163450.00	-2.853E-03
72.05	0.7537	163464.75	-2.673E-03

TEMPERATURA = 160.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	164717.25	0.000E+00
2.50	0.2864	164633.50	-1.017E-03
3.59	0.4033	164445.75	-3.297E-03
5.00	0.5401	164049.50	-8.108E-03
6.43	0.6525	163798.50	-1.115E-02
7.50	0.6608	163539.25	-1.430E-02
10.02	0.7289	163405.75	-1.592E-02
12.52	0.7422	163386.25	-1.616E-02
15.00	0.7486	163388.75	-1.613E-02
17.52	0.7537	163393.50	-1.607E-02
20.00	0.7576	163420.00	-1.575E-02
25.00	0.7623	163476.75	-1.506E-02
30.01	0.7672	163515.75	-1.422E-02
35.00	0.7700	163584.75	-1.375E-02
40.00	0.7737	163624.75	-1.327E-02
45.01	0.7762	163674.00	-1.267E-02
50.02	0.7780	163711.25	-1.221E-02
55.00	0.7801	163743.50	-1.182E-02
60.00	0.7819	163789.75	-1.126E-02
65.02	0.7840	163815.75	-1.095E-02
70.00	0.7858	163858.00	-1.043E-02
72.05	0.7864	163870.50	-1.028E-02

TEMPERATURA = 150.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162753.50	0.000E+00
2.51	0.2879	162542.75	-2.590E-03
5.00	0.5419	161867.00	-1.089E-02
7.50	0.7154	161555.00	-1.473E-02
10.02	0.7522	161533.75	-1.499E-02
12.52	0.7665	161556.00	-1.472E-02
15.01	0.7734	161575.50	-1.448E-02
20.02	0.7820	161668.50	-1.333E-02
25.01	0.7865	161710.00	-1.282E-02
30.01	0.7910	161762.25	-1.218E-02
35.00	0.7934	161808.00	-1.162E-02
40.00	0.7959	161859.50	-1.099E-02
45.03	0.7979	161913.50	-1.032E-02
50.02	0.8003	161960.00	-9.751E-03
55.00	0.8018	162000.00	-9.259E-03
60.00	0.8040	162034.50	-8.835E-03
65.00	0.8054	162073.50	-8.356E-03
70.00	0.8061	162125.00	-7.723E-03
72.05	0.8069	162171.00	-7.158E-03

TEMPERATURA = 140.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	171876.00	0.000E+00
2.50	0.2857	171850.75	-2.938E-04
5.00	0.5429	171552.00	-3.770E-03
7.49	0.7318	171293.75	-6.775E-03
9.76	0.7702	171232.00	-7.194E-03
10.00	0.7731	171235.00	-7.459E-03
12.50	0.7898	171214.50	-7.348E-03
15.00	0.7973	171205.50	-7.104E-03
20.02	0.8069	171328.00	-6.377E-03
25.01	0.8106	171387.50	-5.681E-03
30.00	0.8151	171415.00	-5.015E-03
34.99	0.8175	171494.75	-4.436E-03
40.00	0.8211	171515.00	-3.852E-03
45.01	0.8233	171595.50	-3.264E-03
50.00	0.8245	171648.50	-2.647E-03
55.01	0.8265	171699.75	-2.051E-03
60.00	0.8277	171747.50	-1.495E-03
65.00	0.8290	171791.00	-9.891E-04
70.01	0.8302	171826.00	-5.819E-04
72.07	0.8310	171845.75	-3.520E-04

TEMPERATURA = 100.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	172432.75	0.000E+00
2.51	0.2937	172432.00	-8.699E-06
5.00	0.5527	172293.50	-1.615E-03
7.53	0.7682	172112.50	-3.711E-03
10.01	0.8468	171956.00	-5.530E-03
12.49	0.8705	171973.50	-5.327E-03
15.00	0.8840	171958.50	-5.501E-03
17.51	0.8914	171935.00	-5.773E-03
20.00	0.8959	171942.50	-5.686E-03
22.49	0.8972	171957.00	-5.518E-03
25.00	0.8983	171978.00	-5.275E-03
30.00	0.9004	172013.00	-4.869E-03
35.00	0.9020	172052.00	-4.416E-03
40.02	0.9032	172100.50	-3.854E-03
45.00	0.9053	172111.50	-3.378E-03
50.00	0.9065	172183.50	-2.891E-03
55.00	0.9073	172223.00	-2.433E-03
60.01	0.9081	172260.00	-2.004E-03
65.02	0.9098	172295.75	-1.589E-03
70.00	0.9106	172340.00	-1.076E-03
72.08	0.9114	172354.50	-9.076E-04

TEMPERATURA = 120.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	172254.00	0.000E+00
2.50	0.2878	172252.50	-1.742E-05
5.00	0.5490	172037.00	-2.520E-03
7.51	0.7531	171841.50	-4.755E-03
10.00	0.8144	171763.25	-5.698E-03
12.52	0.8344	171748.00	-5.875E-03
15.01	0.8458	171740.75	-5.959E-03
20.00	0.8546	171755.50	-5.788E-03
25.00	0.8576	171788.00	-5.411E-03
30.00	0.8605	171835.50	-4.859E-03
35.02	0.8621	171877.75	-4.369E-03
40.00	0.8650	171919.50	-3.844E-03
45.00	0.8662	171963.75	-3.370E-03
50.02	0.8672	172010.50	-2.827E-03
55.00	0.8685	172050.50	-2.363E-03
60.01	0.8695	172097.50	-1.817E-03
65.03	0.8703	172136.00	-1.370E-03
70.00	0.8711	172176.00	-9.056E-04
72.08	0.8715	172193.00	-7.083E-04

TEMPERATURA = 80.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	172374.50	0.000E+00
2.51	0.2823	172373.00	-1.710E-05
5.02	0.5442	172316.00	-6.788E-04
7.51	0.7692	172158.75	-2.503E-03
10.00	0.8781	171837.00	-6.236E-03
12.52	0.9083	172005.00	-4.287E-03
15.00	0.9235	171983.00	-4.542E-03
20.00	0.9386	171970.00	-4.693E-03
25.00	0.9425	172003.00	-4.310E-03
30.00	0.9442	172017.00	-3.800E-03
35.00	0.9452	172085.50	-3.353E-03
39.98	0.9472	172124.00	-2.906E-03
45.00	0.9482	172168.00	-2.376E-03
49.99	0.9493	172208.50	-1.926E-03
55.00	0.9505	172244.50	-1.508E-03
60.00	0.9511	172285.00	-1.038E-03
65.00	0.9517	172323.50	-5.917E-04
68.64	0.9520	172346.00	-3.307E-04
69.98	0.9521	172354.50	-2.321E-04
72.08	0.9523	172367.25	-8.412E-05

C₂₁₂₁ (k//a, p//b), h//c:

TEMPERATURA = 300.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	156185.75	0.000E+00
10.01	0.0316	156185.75	0.000E+00
20.00	0.0628	156197.00	1.411E-04
30.00	0.0934	156213.25	3.521E-04
40.00	0.1228	156234.75	6.275E-04
45.00	0.1366	156245.00	7.587E-04
50.00	0.1500	156256.00	8.996E-04
54.98	0.1628	156268.00	1.053E-03
60.00	0.1750	156279.00	1.194E-03
65.00	0.1863	156293.25	1.377E-03
69.98	0.1973	156303.00	1.501E-03
72.04	0.2021	156308.00	1.565E-03

TEMPERATURA = 290.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	156428.75	0.000E+00
10.00	0.0370	156434.25	7.032E-05
20.02	0.0741	156449.25	2.621E-04
25.01	0.0920	156460.50	4.059E-04
30.01	0.1096	156474.50	5.849E-04
35.00	0.1262	156489.00	7.703E-04
40.01	0.1426	156507.50	1.007E-03
45.00	0.1580	156525.25	1.231E-03
50.00	0.1728	156546.25	1.502E-03
55.00	0.1871	156563.00	1.716E-03
60.00	0.2007	156582.00	1.959E-03
65.00	0.2136	156601.50	2.209E-03
70.00	0.2260	156620.00	2.445E-03
72.04	0.2310	156627.25	2.538E-03

TEMPERATURA = 280.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	156703.00	0.000E+00
9.98	0.0443	156712.50	1.212E-04
15.00	0.0664	156722.00	2.125E-04
20.02	0.0877	156737.00	4.339E-04
25.00	0.1086	156755.00	6.637E-04
30.01	0.1289	156774.50	9.126E-04
35.02	0.1455	156799.25	1.228E-03
39.98	0.1677	156824.25	1.548E-03
45.01	0.1859	156851.75	1.898E-03
50.02	0.2026	156882.00	2.285E-03
54.98	0.2184	156910.00	2.642E-03
60.00	0.2335	156937.00	2.987E-03
65.02	0.2477	156963.50	3.325E-03
70.01	0.2613	156991.00	3.676E-03
72.05	0.2664	157001.75	3.813E-03

TEMPERATURA = 270.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157005.50	0.000E+00
9.98	0.0530	157018.75	1.688E-04
15.00	0.0794	157035.25	3.790E-04
19.99	0.1047	157054.25	6.210E-04
25.01	0.1307	157079.75	9.458E-04
30.01	0.1539	157111.50	1.350E-03
34.99	0.1768	157145.50	1.783E-03
40.00	0.1982	157187.50	2.318E-03
44.99	0.2177	157228.75	2.844E-03
50.02	0.2353	157274.25	3.423E-03
55.00	0.2521	157313.25	3.920E-03
60.01	0.2676	157352.00	4.414E-03
65.00	0.2821	157396.75	4.857E-03
70.00	0.2968	157423.50	5.325E-03
72.05	0.3040	157436.00	5.484E-03

TEMPERATURA = 260.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157292.75	0.000E+00
5.00	0.0327	157300.75	1.017E-04
10.00	0.0655	157317.00	3.083E-04
15.00	0.0974	157350.00	7.279E-04
20.02	0.1291	157393.00	1.275E-03
25.02	0.1590	157443.75	1.920E-03
29.99	0.1870	157500.50	2.642E-03
35.00	0.2111	157564.00	3.449E-03
40.00	0.2347	157628.25	4.266E-03
45.01	0.2555	157687.00	5.013E-03
50.00	0.2750	157741.50	5.796E-03
54.98	0.2930	157794.00	6.373E-03
60.01	0.3093	157847.75	7.057E-03
65.02	0.3236	157909.25	7.839E-03
70.00	0.3376	157975.50	8.681E-03
72.07	0.3425	158003.50	9.037E-03

TEMPERATURA = 250.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTA/C
0.00	0.0000	157493.75	0.000E+00
5.02	0.0590	157515.25	2.730E-04
10.00	0.1143	157567.00	9.302E-04
14.99	0.1643	157624.00	1.654E-03
20.02	0.2062	157698.25	2.597E-03
25.01	0.2431	157807.00	3.978E-03
30.00	0.2759	157904.50	5.216E-03
35.00	0.3029	157973.00	6.086E-03
40.00	0.3268	158037.75	6.908E-03
45.01	0.3471	158133.25	8.121E-03
50.02	0.3654	158213.50	9.521E-03
55.01	0.3811	158329.75	1.062E-02
60.00	0.3955	158389.25	1.137E-02
65.00	0.4084	158438.50	1.200E-02
70.02	0.4197	158494.50	1.271E-02
72.04	0.4241	158515.75	1.298E-02

TEMPERATURA = 240.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	157698.50	0.000E+00
5.00	0.0997	157742.00	5.517E-04
9.98	0.1836	157857.50	2.017E-03
15.00	0.2467	158002.50	3.855E-03
19.99	0.2946	158134.00	5.523E-03
25.00	0.3301	158253.50	7.039E-03
30.00	0.3588	158368.50	8.497E-03
35.00	0.3819	158474.00	9.835E-03
39.98	0.4008	158572.00	1.108E-02
45.01	0.4166	158660.00	1.219E-02
50.00	0.4315	158740.25	1.321E-02
54.98	0.4449	158811.50	1.412E-02
60.01	0.4563	158878.00	1.496E-02
65.00	0.4674	158942.00	1.577E-02
70.01	0.4775	159001.00	1.652E-02
72.05	0.4814	159021.00	1.677E-02

TEMPERATURA = 225.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	158670.50	0.000E+00
2.50	0.2029	158672.75	2.836E-05
5.00	0.2934	158817.25	1.850E-03
9.98	0.3652	159001.50	4.210E-03
15.00	0.4052	159148.00	6.019E-03
19.99	0.4311	159269.00	7.544E-03
25.01	0.4577	159385.50	9.012E-03
30.00	0.4746	159486.00	1.028E-02
35.00	0.4899	159581.00	1.148E-02
39.97	0.5026	159665.75	1.254E-02
45.03	0.5136	159741.75	1.354E-02
50.00	0.5230	159814.25	1.442E-02
54.97	0.5338	159877.50	1.521E-02
60.00	0.5391	159935.00	1.594E-02
65.02	0.5460	159999.50	1.663E-02
70.00	0.5534	160013.50	1.731E-02
72.04	0.5561	160061.50	1.753E-02

TEMPERATURA = 235.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	157899.75	0.000E+00
5.00	0.1372	158000.50	1.276E-03
7.50	0.1901	158093.75	2.457E-03
10.00	0.2159	158186.00	3.626E-03
12.50	0.2652	158265.25	4.630E-03
15.00	0.2940	158340.50	5.583E-03
17.51	0.3189	158415.50	6.533E-03
19.99	0.3388	158487.00	7.438E-03
22.49	0.3566	158553.00	8.274E-03
24.98	0.3711	158614.50	9.053E-03
30.00	0.3967	158728.00	1.049E-02
35.00	0.4181	158835.50	1.185E-02
40.00	0.4356	158928.00	1.302E-02
45.00	0.4528	159012.00	1.409E-02
50.00	0.4637	159088.50	1.506E-02
55.00	0.4749	159153.50	1.588E-02
60.00	0.4843	159216.75	1.668E-02
65.00	0.4931	159268.50	1.734E-02
69.98	0.5018	159329.00	1.810E-02
72.04	0.5060	159348.50	1.835E-02

TEMPERATURA = 220.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	158849.50	0.000E+00
2.51	0.2197	158944.75	1.199E-03
5.00	0.3757	159176.00	4.111E-03
10.00	0.4257	159356.00	6.377E-03
15.00	0.4558	159499.00	8.178E-03
20.00	0.4774	159626.00	9.777E-03
25.00	0.4933	159730.00	1.109E-02
30.00	0.5083	159828.50	1.233E-02
35.03	0.5210	159918.75	1.346E-02
40.02	0.5322	160000.00	1.449E-02
45.00	0.5413	160071.50	1.539E-02
50.00	0.5486	160136.50	1.620E-02
55.01	0.5556	160194.00	1.693E-02
60.00	0.5625	160251.00	1.765E-02
65.00	0.5688	160300.50	1.827E-02
70.00	0.5751	160345.50	1.884E-02
72.05	0.5792	160365.00	1.908E-02

TEMPERATURA = 215.0 K

TEMPERATURA = 230.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	158204.00	0.000E+00
2.48	0.1397	158212.50	1.075E-04
5.00	0.2259	158353.75	1.893E-03
10.01	0.3134	158563.00	4.538E-03
15.01	0.3654	158728.75	6.634E-03
20.00	0.4010	158869.50	8.416E-03
25.00	0.4272	158988.00	9.911E-03
30.00	0.4472	159094.00	1.125E-02
35.02	0.4634	159193.75	1.251E-02
40.00	0.4779	159284.50	1.366E-02
45.00	0.4910	159366.00	1.469E-02
50.00	0.5024	159439.50	1.562E-02
55.01	0.5102	159504.00	1.643E-02
59.99	0.5205	159566.00	1.722E-02
65.02	0.5274	159624.00	1.795E-02
70.00	0.5352	159682.50	1.869E-02
72.05	0.5387	159698.00	1.889E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159326.00	0.000E+00
2.48	0.2695	159374.00	6.025E-04
5.03	0.4266	159637.50	3.847E-03
10.01	0.4725	159808.00	6.050E-03
15.01	0.4946	159940.00	7.707E-03
19.99	0.5137	160055.00	9.151E-03
25.01	0.5280	160155.00	1.041E-02
30.00	0.5396	160245.50	1.154E-02
35.00	0.5498	160325.50	1.255E-02
40.00	0.5586	160398.00	1.346E-02
45.00	0.5672	160461.00	1.429E-02
50.00	0.5774	160519.00	1.498E-02
55.00	0.5798	160573.50	1.566E-02
60.03	0.5856	160624.00	1.629E-02
65.02	0.5909	160674.00	1.692E-02
70.00	0.5966	160715.00	1.744E-02
72.05	0.5992	160730.00	1.762E-02

TEMPERATURA = 210.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	159805.00	0.000E+00
5.02	0.4640	150079.25	3.432E-03
10.01	0.5120	160245.50	5.513E-03
15.00	0.5313	160365.75	7.018E-03
19.99	0.5456	160460.50	8.204E-03
25.02	0.5579	160550.50	9.330E-03
30.01	0.5674	160632.00	1.035E-02
35.00	0.5760	160695.75	1.115E-02
40.00	0.5842	160753.50	1.187E-02
45.01	0.5908	160810.25	1.258E-02
49.99	0.5973	160864.25	1.326E-02
55.00	0.6031	160911.25	1.384E-02
60.01	0.6084	160958.00	1.443E-02
64.99	0.6129	160999.00	1.494E-02
70.00	0.6166	161043.50	1.550E-02
72.05	0.6199	161058.75	1.569E-02

TEMPERATURA = 180.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161929.00	0.000E+00
2.50	0.2847	161941.50	1.544E-04
5.00	0.5411	162033.75	1.294E-03
7.51	0.6421	162398.25	5.796E-03
10.01	0.6625	162444.00	6.361E-03
15.01	0.6778	162518.50	7.291E-03
20.00	0.6867	162577.00	8.004E-03
24.98	0.6932	162631.25	8.674E-03
30.03	0.6984	162680.75	9.285E-03
35.00	0.7024	162726.25	9.847E-03
39.98	0.7069	162771.25	1.040E-02
45.01	0.7109	162810.25	1.088E-02
50.02	0.7137	162840.50	1.126E-02
55.01	0.7164	162872.25	1.165E-02
65.00	0.7214	162932.00	1.239E-02
70.01	0.7238	162957.50	1.270E-02
72.07	0.7252	162967.50	1.283E-02

TEMPERATURA = 200.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	160372.75	0.000E+00
2.48	0.2907	160462.00	1.113E-03
5.02	0.5144	160681.75	3.854E-03
7.50	0.5607	160871.75	6.223E-03
10.00	0.5753	160927.75	6.921E-03
12.50	0.5836	160979.00	7.561E-03
15.00	0.5895	161025.50	8.140E-03
17.50	0.5954	161067.50	8.664E-03
20.02	0.6009	161111.75	9.216E-03
22.51	0.6051	161146.25	9.646E-03
25.01	0.6094	161178.25	1.005E-02
30.01	0.6175	161249.75	1.094E-02
35.00	0.6244	161313.00	1.173E-02
40.00	0.6297	161370.75	1.245E-02
45.03	0.6344	161426.75	1.311E-02
50.00	0.6398	161467.25	1.365E-02
54.98	0.6441	161510.50	1.419E-02
59.99	0.6482	161551.00	1.469E-02
65.00	0.6506	161600.50	1.531E-02
69.98	0.6545	161631.75	1.570E-02
72.04	0.6567	161640.50	1.581E-02

TEMPERATURA = 170.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	162508.50	0.000E+00
5.00	0.5345	162582.00	9.046E-04
7.53	0.6697	163010.75	6.181E-03
10.01	0.6946	163066.25	6.864E-03
15.01	0.7126	163120.50	7.532E-03
19.99	0.7224	163169.75	8.138E-03
25.00	0.7273	163214.00	8.683E-03
30.00	0.7322	163258.50	9.230E-03
35.02	0.7363	163294.50	9.673E-03
40.00	0.7396	163330.00	1.011E-02
45.00	0.7428	163364.25	1.053E-02
50.02	0.7449	163393.25	1.089E-02
55.00	0.7479	163417.25	1.118E-02
59.99	0.7494	163441.25	1.148E-02
65.02	0.7518	163469.50	1.183E-02
70.00	0.7531	163498.00	1.218E-02
72.07	0.7547	163507.25	1.229E-02

TEMPERATURA = 160.0 K

TEMPERATURA = 190.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	161216.75	0.000E+00
2.48	0.2766	161229.00	1.520E-04
4.99	0.5198	161345.75	1.600E-03
6.25	0.5711	161574.25	4.435E-03
10.01	0.6114	161674.75	5.682E-03
15.01	0.6273	161754.50	6.671E-03
20.02	0.6371	161831.00	7.620E-03
25.01	0.6444	161895.75	8.423E-03
30.01	0.6505	161945.50	9.041E-03
34.98	0.6558	162002.50	9.748E-03
40.00	0.6603	162052.00	1.036E-02
45.01	0.6648	162103.75	1.100E-02
50.00	0.6697	162146.25	1.153E-02
55.00	0.6725	162183.50	1.199E-02
60.00	0.6762	162222.75	1.248E-02
65.00	0.6794	162251.25	1.283E-02
70.01	0.6819	162286.25	1.327E-02
72.04	0.6839	162299.00	1.343E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	163073.00	0.000E+00
5.02	0.5325	163129.75	6.960E-04
7.51	0.6943	163595.75	6.411E-03
10.00	0.7263	163706.50	7.770E-03
15.01	0.7437	163756.00	8.377E-03
20.00	0.7510	163800.75	8.925E-03
25.01	0.7559	163840.00	9.407E-03
30.03	0.7595	163877.50	9.867E-03
35.00	0.7628	163908.25	1.021E-02
40.01	0.7652	163934.25	1.056E-02
45.01	0.7677	163970.00	1.100E-02
50.02	0.7693	163995.75	1.132E-02
55.01	0.7709	164020.75	1.162E-02
60.01	0.7717	164043.00	1.190E-02
65.03	0.7735	164061.50	1.212E-02
70.00	0.7750	164077.75	1.232E-02
72.07	0.7762	164087.75	1.245E-02

TEMPERATURA = 150.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	163608.00	0.000E+00
5.00	0.5375	163648.00	4.890E-04
7.50	0.7066	164064.75	5.583E-03
10.00	0.7497	164291.00	8.319E-03
15.00	0.7693	164335.25	8.390E-03
20.02	0.7752	164391.00	9.449E-03
25.02	0.7801	164414.75	9.862E-03
30.00	0.7836	164445.75	1.024E-02
35.02	0.7858	164473.00	1.057E-02
40.01	0.7887	164497.50	1.087E-02
45.00	0.7909	164522.75	1.118E-02
50.00	0.7924	164541.75	1.141E-02
55.00	0.7934	164565.75	1.171E-02
60.00	0.7956	164577.75	1.195E-02
65.11	0.7969	164600.75	1.214E-02
70.01	0.7977	164613.50	1.229E-02
72.07	0.7983	164616.00	1.232E-02

TEMPERATURA = 100.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	165681.00	0.000E+00
5.00	0.5387	165692.50	1.388E-04
7.49	0.7371	165879.25	2.393E-03
10.00	0.8181	166185.25	6.067E-03
12.50	0.8489	166490.25	8.682E-03
15.00	0.8611	166573.50	1.077E-02
20.00	0.8680	166648.50	1.169E-02
25.01	0.8708	166697.50	1.191E-02
30.01	0.8736	166685.00	1.212E-02
35.00	0.8748	166706.25	1.238E-02
40.02	0.8757	166714.75	1.248E-02
45.04	0.8773	166724.50	1.260E-02
50.00	0.8785	166738.25	1.276E-02
55.00	0.8789	166718.25	1.288E-02
59.99	0.8789	166757.00	1.299E-02
65.02	0.8789	166772.75	1.318E-02
70.01	0.8789	166783.25	1.331E-02
72.07	0.8789	166783.75	1.331E-02

TEMPERATURA = 140.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	163998.00	0.000E+00
5.02	0.5362	164057.50	7.256E-04
7.49	0.6977	164414.75	5.448E-03
10.01	0.7465	164800.75	9.790E-03
15.01	0.7901	164815.50	1.034E-02
20.00	0.7956	164881.00	1.077E-02
25.02	0.7985	164909.00	1.111E-02
30.00	0.8017	164934.75	1.142E-02
35.00	0.8041	164965.75	1.180E-02
40.00	0.8061	164988.75	1.208E-02
45.01	0.8086	165011.75	1.236E-02
50.00	0.8094	165023.00	1.250E-02
55.00	0.8106	165036.75	1.267E-02
60.04	0.8122	165058.00	1.293E-02
65.02	0.8134	165075.00	1.313E-02
70.01	0.8142	165086.50	1.327E-02
72.07	0.8154	165094.00	1.337E-02

TEMPERATURA = 80.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	166281.75	0.000E+00
5.02	0.5400	166287.25	6.615E-05
7.51	0.7504	166424.50	1.717E-03
10.02	0.8336	166689.75	4.907E-03
12.48	0.8734	166876.75	7.157E-03
15.00	0.8880	167021.50	8.898E-03
20.03	0.8965	167255.25	1.171E-02
24.98	0.8986	167321.00	1.250E-02
30.00	0.9010	167313.25	1.277E-02
35.00	0.9018	167358.00	1.294E-02
40.00	0.9023	167359.50	1.308E-02
45.01	0.9043	167380.75	1.322E-02
50.00	0.9051	167386.00	1.328E-02
60.01	0.9051	167394.00	1.338E-02
70.02	0.9051	167405.00	1.351E-02
72.07	0.9051	167410.50	1.358E-02

TEMPERATURA = 120.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	164896.25	0.000E+00
4.99	0.5352	164923.50	3.305E-04
7.51	0.7217	165228.00	4.021E-03
9.98	0.7926	165593.25	8.454E-03
15.07	0.8270	165822.75	1.124E-02
19.99	0.8341	165813.75	1.149E-02
25.00	0.8362	165869.50	1.180E-02
29.99	0.8390	165888.50	1.203E-02
35.03	0.8407	165907.50	1.227E-02
40.01	0.8423	165923.75	1.246E-02
45.03	0.8431	165943.00	1.270E-02
50.02	0.8447	165955.00	1.284E-02
55.00	0.8468	165969.75	1.302E-02
60.00	0.8472	165981.00	1.316E-02
65.02	0.8472	165989.00	1.325E-02
70.00	0.8472	165998.50	1.337E-02
72.05	0.8472	166002.25	1.341E-02

TEMPERATURA = 60.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELTC/C
0.00	0.0000	167104.00	0.000E+00
5.00	0.5470	167105.50	1.795E-05
10.02	0.8620	167433.25	3.941E-03
12.52	0.9035	167599.00	5.921E-03
15.01	0.9205	167729.00	7.489E-03
17.48	0.9280	167827.25	8.656E-03
20.00	0.9314	167919.00	9.754E-03
25.00	0.9350	168072.50	1.159E-02
30.00	0.9362	168162.25	1.267E-02
35.02	0.9374	168178.25	1.286E-02
40.00	0.9395	168183.75	1.292E-02
45.03	0.9403	168191.00	1.301E-02
50.00	0.9411	168195.00	1.306E-02
54.98	0.9411	168199.50	1.311E-02
59.97	0.9411	168205.00	1.318E-02
65.00	0.9411	168209.00	1.323E-02
72.04	0.9411	168210.25	1.324E-02

TEMPERATURA = 40.0 K

TEMPERATURA = 20.0 K

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	167489.50	0.000E+00
2.50	0.2857	167484.25	-6.269E-05
5.00	0.5430	167486.75	-3.281E-05
7.51	0.7720	167547.50	6.926E-04
10.01	0.8721	167775.25	3.412E-03
12.50	0.9256	167900.25	4.905E-03
15.01	0.9479	168017.50	6.305E-03
17.51	0.9566	168112.75	7.442E-03
19.99	0.9604	168195.75	8.433E-03
24.98	0.9637	168329.25	1.003E-02
30.01	0.9669	168427.50	1.120E-02
35.00	0.9683	168482.25	1.165E-02
40.00	0.9690	168501.00	1.208E-02
50.00	0.9714	168516.50	1.226E-02
60.00	0.9728	168517.75	1.228E-02
72.04	0.9728	168520.75	1.231E-02

H	SIGMA	FREQ	DELC/C
0.00	0.0000	167826.25	0.000E+00
5.00	0.5306	167821.75	-5.363E-05
9.98	0.8791	168080.00	3.021E-03
15.00	0.9629	168312.50	5.795E-03
20.00	0.9724	168459.25	7.544E-03
25.02	0.9759	168581.00	8.994E-03
30.03	0.9771	168664.00	9.981E-03
34.99	0.9783	168713.25	1.057E-02
39.98	0.9791	168739.00	1.068E-02
45.00	0.9795	168751.75	1.103E-02
50.02	0.9799	168753.25	1.105E-02
55.00	0.9799	168756.75	1.109E-02
60.00	0.9799	168752.00	1.103E-02
65.03	0.9799	168754.25	1.106E-02
70.01	0.9799	168754.00	1.106E-02
72.04	0.9799	168754.00	1.106E-02

APÊNDICE D

PROGRAMAS DE COMPUTADOR

Neste apêndice nós apresentamos os principais programas e subrotinas usados nos cálculos com o modelo teórico, em FORTRAN IV. Nós também mostramos, em um fluxograma simplificado, as principais características deste cálculo.

```

C      MAIN
C      MAIN PROGRAM FOR ELASTIC CONSTANTS CALCULATION
C      CALCULA AS DERIVADAS PRIMEIRAS E SEGUNDAS DA ENERGIA LIVRE
C      A TEMPERATURA CONSTANTE. CALCULA TAMBEM AS DERIVADAS SEGUNDAS
C      DA ENERGIA INTERNA A ENTROPIA E TEMPERATURA CONSTANTE. PERMITE
C      QUE ESTES RESULTADOS SEJAM ARMAZENADOS EM DISCO.
      IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
      COMMON/MISBLK/T,J,N,N1,N2,N6/JBLK/JZ(17),J2(17),J4(17),J6(17),
1JX(16),J21P(16),J22P(15),J66P(11)/GBLN/Q,GX,GZ/SHBLN/SX,SZ,HX,HZ,
1AX,AZ,U,F,Z/HOBLK/HO(17),H1(16),H2(15)/CBLK/C1A,C2A,CG,CE
1/BBLK/B1A,B2A,BG,BE/G2BLK/G1A0,G2A0,G1A2,G2A2,GG/PBLK/P2,P4,P6,
1P66/EBLK/EE(4)/FBLK/F1(5)/HMBLK/H(17,17)/DIABLK/E(17),EX(17),
1A(17,17)/CRBLK/DIV(153),ET(23,17)/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),
      1 SE(10,2)/DERBLK/DER(18),CER(18),BER(18)/FIRST/UA,UB,UD,UP,UQ
      2 /FRDER/NXZ,NT,FDR(25,5),HP(25),SP(25),EP(4,25)
      3 /DRBLK/DEP(18,25,3)/DSIBLK/DESA(25,3),DESB(25,3)
      1,DESP(25,3),DEPSQ(25,3)
      DIMENSION DO(18),FO(5),EE0(4),EEP(4)
      1,THP(25),CP(25),CO(18),BO(18)
102    FORMAT(1H1)
      CALL ERRSET(0)
      TYPE 133
133    FORMAT(/' WANT STANDARD VALUES? 1=YES, 2=NO')
      ACCEPT 139,NDATA
139    FORMAT(1G)
      TYPE 140
140    FORMAT(/' PRINT FIRST DERIVS? 1=Y, 2=N')
      ACCEPT 139,NFRST
      IF(NFRST.EQ.1) CALL FDER(7,IFINA,K,NH,NFL)
      GO TO (901,902),NDATA
901    CALL STD
      GO TO 951
902    CALL PNT(1)
      ACCEPT 103,J
103    FORMAT(1G)
104    FORMAT(/' J = ',F5.1)
951    CALL JCALC
      DO 111=1,4
11    EE(1)=0
      GO TO (952,800),NDATA
800    CALL PNT(2)
      ACCEPT 105,G,GX,GZ
105    FORMAT(3G)
      Q=6.718736415D-2*G
106    FORMAT(/' G-FACTOR = ',F10.5,' EXCHANGE CONSTANTS: GX = ',F10.5
1,' GZ = ',F10.5)
801    CALL PNT(3)
      ACCEPT 107,P2,P4,P6,P66
107    FORMAT(4G)
952    DO 132I=1,N
      DO 132K=1,N
132    H(I,K)=0
      DO 131I=1,N6
131    H(I,I+6)=P66*J66P(I)

```

```

      GO TO (805,802),NDATA
108  FORMAT(/ ' CRYSTAL-FIELD: P2 = ',1PD12.5,' P4 = ',D12.5,' P6
      1 = ',D12.5,' P66 = ',D12.5)
802  CALL PNT(4)
      ACCEPT 107, C1A,C2A,CG,CE
110  FORMAT(/ ' ELASTIC CONSTANTS: C1A = ',1PD12.5,' C2A = ',D12.5,'
      1 CG = ',D12.5,' CE = ',D12.5)
803  CALL PNT(5)
      ACCEPT 107, B1A,B2A,BG,BE
112  FORMAT(/ ' ONE-ION ME CONSTANTS: B1A = ',1PD12.5,' B2A = ',D12.5,'
      1 BG = ',D12.5,' BE = ',D12.5)
804  CALL PNT(6)
      ACCEPT 113, G1A0,G2A0,G1A2,G2A2,GG,GE
113  FORMAT(6G)
114  FORMAT(/ ' TWO-ION ME CONSTANTS: G1A0 = ',1PD12.5,' G2A0 = ',D12.5
      1/2X,'G1A2 = ',D12.5,' G2A2 = ',D12.5,' GG = ',D12.5,' GE =
      1',D12.5)
805  WRITE(6,102)
      G=Q/6.718736415D-2
      WRITE(6,104)J
      WRITE(6,106)G,GX,GZ
      WRITE(6,108)P2,P4,P6,P66
      WRITE(6,110)C1A,C2A,CG,CE
      WRITE(6,112)B1A,B2A,BG,BE
      WRITE(6,114)G1A0,G2A0,G1A2,G2A2,GG,GE
      CALL PNT(7)
      IF(NFL.NE.2) CALL OFILE(1,IFINA)
400  ACCEPT 201, TO,DT,NT,HQ,DH,NH,NXZ,NC,TL
201  FORMAT(9G)
      T=TO-DT
      I=(NFL.NE.2) CALL FDER(2,IFINA,K,NH,NFL)
      DO 1001 IT=1,NT
      T=T+DT
      SX=1
      GO TO(401,402),NXZ
401  CONTINUE
      SZ=0
      HZ=0
      DHZ=0
      HX=HQ-DH
      DHX=DH
      WRITE(6,1401)T,HZ,TL
1401  FORMAT('1TEMP = ',F6.0,' HZ = ',F6.0,' MAGTOL = ',
      1 1PD12.5/)
      WRITE (6,1901)
1901  FORMAT(' HX ',7X,'SIGMA',11X,'THETA',11X,'I 5/2',13X,'E1A',
      1 13X,'E2A',13X,'E1G',13X,'E2E'/)
      GO TO 403
402  SX=1
      SZ=0
      HX=0
      DHX=0
      HZ=HQ-DH
      DHZ=DH
      WRITE(6,1402)T,HX,TL
1402  FORMAT('1TEMP = ',F6.0,' HX = ',F6.0,' MAGTOL = ',
      1 1PD12.5/)
      WRITE (6,1902)
1902  FORMAT(' HZ ',7X,'SIGMA',11X,'THETA',11X,'I 5/2',13X,'E1A',
      1 13X,'E2A',13X,'E1G',13X,'E2E'/)
403  DO 404 K=1,5
404  FO(K)=0
      DO 405 K=1,18
      BO(K)=0
      CO(K)=0
405  DO(K)=0
      DO 601 K=1,4
      EE(K)=EE0(K)
601  EE0(K)=0

```

```

      IF(NFL.NE.2) CALL FDER(3,IFINA,K,NH,NFL)
DO 1000 K=1,NH
HZ=HZ+DHZ
HX=HX+DHX
AX=Q*HX+GX*SX
AZ=Q*HZ+GZ*SZ
CALL MAGSTR(TL,NXZ)
CALL ENCOR(NXZ)
CALL SUMCAL
CALL DEFCAL
      IF(NFRST.EQ.1) CALL FDER(4,IFINA,K,NH,NFL)
      DO 406 L=1,5
F1(L)=F1(L)-F0(L)
      IF(K.EQ.1)F0(L)=F1(L)
406  CONTINUE
C      DO 407 L = 1,18
C      BER(L)=BER(L)-B0(L)
C      CER(L)=CER(L)-C0(L)
C      DER(L)=DER(L)-D0(L)
C      IF(K.NE.1) GO TO 407
C      B0(L)=BER(L)
C      C0(L)=CER(L)
C      D0(L)=DER(L)
C407  CONTINUE
DO 710 L=1,4
EEP(L)=EE(L)-EE0(L)
      IF(K.EQ.1)EE0(L)=EE(L)
710  CONTINUE
SIG=DSQRT(SX*SX+SZ*SZ)
TH=57.29577951*DATAH(SZ/SX)
      HW=HX
      IF (NXZ.EQ.2)HW=HZ
      HP(K)=HW
      SP(K)=SIG
      THP(K)=TH
      CALL I52(SIG,CA)
      CP(K)=CA
      DO 990 L=1,4
990  EP(L,K)=EEP(L)
      DO 991 L=1,18
      DEP(L,K,1)=DER(L)
      DEP(L,K,2)=CER(L)
991  DEP(L,K,3)=BER(L)
      TYPE 999,IT,K,T,HX,HZ,SIG
999  FORMAT(2I7,F8.0,F8.0,F8.0,E15.4)
1000 CONTINUE
      CALL ACBRE(J,GX,GZ,NH)
      CALL FICOR(J,GX,GZ,NH)
      DO 1100 L1=1,18
      DO 1100 L2=1,25
      DO 1100 L3=1,3
      IF(L1.EQ.4.AND.NXZ.EQ.1)DEP(4,L2,L3)=DEP(4,L2,L3)*J*SP(L2)
      IF(L1.EQ.8.AND.NXZ.EQ.1)DEP(8,L2,L3)=DEP(8,L2,L3)*J*SP(L2)
      IF(L1.EQ.11.AND.NXZ.EQ.1)DEP(11,L2,L3)=DEP(11,L2,L3)*J*SP(L2)
      IF(L1.EQ.13.AND.NXZ.EQ.1)DEP(13,L2,L3)=DEP(13,L2,L3)*J*J*SP
      1(L2)*SP(L2)
      IF(L1.EQ.5.AND.NXZ.EQ.2)DEP(5,L2,L3)=DEP(5,L2,L3)*J*SP(L2)
      IF(L1.EQ.9.AND.NXZ.EQ.2)DEP(9,L2,L3)=DEP(9,L2,L3)*J*SP(L2)
      IF(L1.EQ.12.AND.NXZ.EQ.2)DEP(12,L2,L3)=DEP(12,L2,L3)*J*SP(L2)
      IF(L1.EQ.15.AND.NXZ.EQ.2)DEP(15,L2,L3)=DEP(15,L2,L3)*J*J*
      1SP(L2)*SP(L2)
1100  CONTINUE
      DO 1110 L1=1,18
      DO 1110 L2=2,25
      DO 1110 L3=1,3
      DEP(L1,L2,L3)=DEP(L1,L2,L3)-DEP(L1,1,L3)
1110  CONTINUE
      DO 1301 I=1,NH
1301  *RITH(6,1302)HP(I),SP(I),THP(I),CP(I),(EP(K,I),K=1,4)
1302  FORMAT(F6.0,1P7D16.5)

```

```

      DO 2000 II=1,3
      WRITE (6,102)
      IF(II.EQ.1) WRITE(6,1909)
1909  FORMAT(/' DERIVATIVES OF THE INTERNAL ENERGY WITH CONSTANT T'//)
      IF(II.EQ.2) WRITE(6,1500)
1500  FORMAT(/' DERIVATIVES OF THE INTERNAL ENERGY WITH CONSTANT S'//)
      IF(II.EQ.3) WRITE(6,1520)
1520  FORMAT(/' DERIVATIVES OF THE FREE ENERGY WITH CONSTANT T'//)
      WRITE (6,1910)
1910  FORMAT('      H ',7X,'UAA',11X,'UAB',11X,'UAD',11X,'UAP',11X,
1      'UAQ',11X,'UBB',11X,'UBD',11X,'UBP',11X,'UBQ'//)
      WRITE(6,1304)(HP(I),(DEP(L,I,II),L=1,9),I=1,NH)
1304  FORMAT(6PF6.0,1P9D14.5)
      WRITE(6,1920)
1920  FORMAT('      H ',7X,'UDD',11X,'UDP',11X,'UDQ',11X,'UPP',11X,
1      'UPQ',11X,'UQQ',11X,'UCC',11X,'UCE',11X,'UEE'//)
      WRITE(6,1304)(HP(I),(DEP(L,I,II),L=10,18),I=1,NH)
2000  CONTINUE
      IF(MFST.EQ.1) CALL FDER(6,IFINA,K,NH,NFL)
1001  CONTINUE
      GO TO(400,500),NC
      ENDFILE 1
500  STOP
      END

```

```

C      HOUSEHOLDER TRIDIAGONALIZATION OF SYMMETRIC MATRIX
      SUBROUTINE TRED
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON /HAMBK/A(17,17)/DIABLK/D(17),E(17),Z(17,17)
      1 /HISBLK/T,TT,N,N1,N2,N6
      DO 10 I=1,N
      DO 10 J=1,N
      Z(I,J)=A(I,J)
10    Z(J,I)=Z(I,J)
      DO 20 II=2,N
      I=N+2-II
      L=I-2
      F=Z(I,I-1)
      G=0
      IF(L.EQ.0)GO TO 21
      DO 30 K=1,L
30    G=G+Z(I,K)**2
21    H=G+F*F
      IF(G.GT.1.32D-23)GO TO 101
      E(I)=F
      H=0
      GOTO102
101   L=L+1
      E(I)=DSQRT(H)
      IF(F.GE.0)E(I)=-E(I)
      G=E(I)
      H=H-F*G
      Z(I,I-1)=F-G
      F=0
      DO 50 J=1,L
      Z(J,I)=Z(I,J)/H
      G=0
      DO 60 K=1,J
60    G=G+Z(J,K)*Z(I,K)
      JJ=J+1
      IF(L.LT.JJ)GO TO 71
      DO 70 K=JJ,L
70    G=G+Z(K,J)*Z(I,K)
71    E(J)=G/H
      F=F+G*Z(J,I)
      HH=F/(H+H)
      DO 80 J=1,L
      F=Z(I,J)
      E(J)=E(J)-HH*F
      G=E(J)

```

```

DO 90 K=1,J
90  Z(J,K)=Z(J,K)-F*E(K)-G*Z(I,K)
80  CONTINUE
102  D(I)=H
20  CONTINUE
    D(1)=0
    E(1)=0
    DO 100 I=1,N
    L=1-1
    IF(D(1).EQ.0.OR.L.EQ.0)GO TO 98
    DO 120 J=1,L
    G=0
    DO 121 K=1,L
121  G=G+Z(I,K)*Z(K,J)
    DO 122 K=1,L
122  Z(K,J)=Z(K,J)-G*Z(K,I)
120  CONTINUE
98  D(I)=Z(1,I)
    Z(1,I)=1
    IF(L.EQ.0)GOTO100
    DO123 J=1,L
    Z(1,J)=0
123  Z(J,I)=0
100  CONTINUE
    RETURN
    END

```

```

C  QL ALGORITHM FOR EIGENVALUES AND EIGENVECTORS OF SYMMETRIC MATRIX
    SUBROUTINE TQL
    IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
    COMMON/DIABLK/D(17),E(17),Z(17,17)/MISBLK/T,U,N,N1,N2,N6
    DO 10I=2,N
10  E(I-1)=E(I)
    E(N)=0
    B=0
    F=0
    DO 20 L=1,N
    J=0
    H=1.1D-16*(DABS(D(L))+DABS(E(L)))
    IF(B.LT.H)B=H
    DO 30 M=L,N
    IF(DABS(E(M)).LE.B)GO TO 31
30  CONTINUE
31  CONTINUE
    IF(M.EQ.L)GO TO 32
40  CONTINUE
    IF(J.EQ.30)GO TO 1000
    J=1+J
    G=D(L)
    P=(D(L+1)-G)/(2*E(L))
    R=DSQRT(1+P*P)
    X=P*R
    IF(P.GT.0)X=P+R
    D(L)=E(L)/X
    H=G-D(L)
    IF(L.EQ.N)GO TO 51
    LL=L+1
    DO 50 I=LL,N
50  D(I)=D(I)-H
51  F=F+H
    P=D(M)
    C=1
    S=0
    IF((M-1).LT.L)GO TO 61
    MM=M-1
    DO 60 II=L,MM
    I=MM-II+L
    G=C*E(I)
    H=C*P
    IF(DABS(P).LT.DABS(E(I)))GO TO 100

```



```

      C=E(I)/P
      R=DSQRT(1+C*C)
      E(I,1)=S*P*R
      S=C/R
      C=1/R
      GO TO 101
100   C=P/E(I)
      R=DSQRT(1+C*C)
      E(I,1)=S*E(I)*R
      S=1/R
      C=C/R
101   P=C*D(I)-S*G
      D(I+1)=H+S*(C*G+S*D(I))
      DO 70 K=1,N
      H=Z(K,1+1)
      Z(K,1+1)=S*Z(K,I)+C*H
70    Z(K,I)=C*Z(K,I)-S*H
60    CONTINUE
61    E(L)=S*P
      D(L)=C*P
      IF(DABS(E(L)).GT.B)GOTO40
32    D(L)=D(L)+F
20    CONTINUE
      DO 200 I=1,N
      K=I
      P=D(I)
      IF(I.EQ.N)GO TO 211
      JJ=1+I
      DO 210 J=JJ,N
      IF(D(J).GE.P)GO TO 210
      K=J
      P=D(J)
210   CONTINUE
211   CONTINUE
      IF(K.EQ.I)GO TO 230
      D(K)=D(I)
      D(I)=P
      DO 240 J=1,N
      P=Z(J,I)
      Z(J,I)=Z(J,K)
240   Z(J,K)=P
230   CONTINUE
200   CONTINUE
      RETURN
1000  WRITE(6,1001)
1001  FORMAT(1H1'EIGENVALUE ROUTINE FAILED')
      STOP
      END

```

C CALCULATION OF J OPERATORS

```

SUBROUTINE JCALC
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/JBLK/JZ(17),J2(17),J4(17),J6(17),JX(16),J21P(16),J22P(15),
1J66P(11)/MISBLK/I,J,N,N1,N2,N6
N=2*J+1.01
JS=J*(J+1)
N1=N-1
N2=N-2
N6=N-6
DO 10 I=1,N
R=J+1-1
R2=R*R
R4=R2*R2
JZ(I)=R
J4(I)=3*R2-JS
J4(I)=35*R4-(30*JS-25)*R2+3*JS*(JS-2)
J6(I)=R4*(231*R2-315*JS+735)+R2*(105*JS*(JS-5)+294)-5*JS*(JS*(JS-8
1)+12)
IF(I.NE.N)JX(I)=DSQRT(JS-R*(R-1))/2
10 CONTINUE

```

```

      DD 20 I=1,N2
20    J22P(I)=JX(I)*JX(I+1)*2
      DD 30 I = 1, N6
30    J66P(I)=4*J22P(I)*J22P(I+2)*J22P(I+4)
      DD 43 I= 1,N1
43    J21P(I)=JX(I)*(JZ(I)+JZ(I+1))
      RETURN
      END

C    CALCULATION OF MAGNETIZATION AND MAGNETOSTRICTION
      SUBROUTINE MAGSTR(TL,NXZ)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
      COMMON/SHBLK/SX,SZ,HX,HZ,AX,AZ,U,F,Z/HOBLK/HO(17),H1(16),H2(15)
1/GBLK/Q,GX,GZ/CBLK/C1A,C2A,CG,CE/BBLK/B1A,B2A,BG,BE/G2BLK/G1A0
1/G2A0,G1A2,G2A2,GG/PBLK/P2,P4,P6,P66/MISBLK/T,J,N,N1,N2,N6/
1/JBLK/JZ(17),J2(17),J4(17),J6(17),JX(16),J21P(16),J22P(15),J66P(11)
1/EBLK/E1A,E2A,E1G,E2E/FBLK/FA,FB,FD,FE,FQ/HAMBLK/H(17,17)
      FO=0
      FP=0
      FQ=0
      G1M=G1A0-G1A2
      G2M=G2A0-G2A2
      G1P=G1A0+2*G1A2
      G2P=G2A0+2*G2A2
      DEL=1.D-6
      NT=0
      IF(DABS(B1A).LT.1.D-6)NT=1
      GZ0=GZ
      GX0=GX
100   P2P=P2-B1A*E1A-B2A*E2A
      P22=-BG*E1G
      P21=-BE*E2E
      GX=GX0+J*(G1M*E1A+G2M*E2A+GG*E1G)
      GZ=GZ0+J*(G1P*E1A+G2P*E2A)
      DD 10 I=1,N
10    H0(I)=P2P*J2(I)+P4*J4(I)+P6*J6(I)
      DD 11 I=1,N1
11    H1(I)=P21*J21P(I)
      DD 12 I=1,N2
12    H2(I)=P22*J22P(I)
      CALL CONV(NT,NXZ)
      IF(NT)14,14,15
14    FO=F
      DD 20 I=1,N
20    H(I,1)=H(I,1)+DEL*J2(I)
      CALL SIGMA
      FA=(F-FO)/DEL
      DD 21 I=1,N
21    H(I,1)=H(I,1)-DEL*J2(I)
      IF(NXZ.EQ.1)GO TO 450
      DD 451 I=1,N
451   H(I,1)=H(I,1)+DEL*JZ(I)
      CALL SIGMA
      FQ=J*SZ*(F-FO)/DEL
      DD 22 I=1,N
22    H(I,1)=H(I,1)-DEL*JZ(I)
450   CONTINUE
      IF(NXZ.NE.3)GO TO 452
      DD 23 I=1,N1
23    H(I,I+1)=H(I,I+1)+DEL*J21P(I)
      CALL SIGMA
      FD=(F-FO)/DEL
      DD 88 I=1,N1
88    H(I,I+1)=H(I,I+1)-2*DEL*J21P(I)
      CALL SIGMA
      FD=.5*(FD-(F-FO)/DEL)
      DD 24 I=1,N1
24    H(I,I+1)=H(I,I+1)+DEL*J21P(I)
452   CONTINUE
      IF(NXZ.EQ.2)GO TO 453

```

```

      DO 454 I=1,N1
454    H(I,I+1)=H(I,I+1)+DEL*JX(I)
      CALL SIGMA
      FP=J*SX*(F-F0)/DEL
      DO 25 I=1,N1
25    H(I,I+1)=H(I,I+1)-DEL*JX(I)
453    DO 26 I=1,N2
26    H(I,I+2)=H2(I)+DEL*J22P(I)
      CALL SIGMA
      FB=(F-F0)/DEL
      E1A1=(B1A*FA-G1M*FP-G1P*FQ)/C1A
      E2A1=(H2A*FA-G2H*FP-G2P*FQ)/C2A
      E1G1=(bG*FB-GG*FP)/CG
      E2E1=BE*FD/CE
      D=DMAX1(DABS(E1A1-E1A),DABS(E2A1-E2A),DABS(E1G1-E1G),DABS(E2E1-E2E
1))
      E1A=E1A1
      E2A=E2A1
      E1G=E1G1
      E2E=E2E1
      DD=DMAX1(DABS(E1A),DABS(E2A),DABS(E1G),DABS(E2E)) + 1,E-6
      NT=1
      DDD=D/DD
      IF((D/DD).GT.TL)NT=0
      GO TO 100
      GX=GX0
      GZ=GZ0
      IF(DABS(E1A).LT.1.D-6)E1A=0
      IF(DABS(E2A).LT.1.D-6)E2A=0
      IF(DABS(E1G).LT.1.D-6)E1G=0
      IF(DABS(E2E).LT.1.D-6)E2E=0
      RETURN
      END

C    CONVERGENCE OF FIELD VS SIGMA
      SUBROUTINE CONV(NT,NXZ)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,J,D-Z)
      COMMON/SHBLK/SX,SZ,HX,HZ,AX,AZ,U,F,Z/HOBLK/H0(17),H1(16),H2(15)
1 /GBLK/Q,GX,GZ/HAMBLK/H(17,17)/MISBLK/T,J,N,N1,N2,N6/JBLK/JZ
1(17),DU(S1),JX(16),DD(42)
      FQ(SX)=(AX-Q*HX)/GX-SX
      FW(SZ)=(AZ-Q*HZ)/GZ-SZ
      D=1.D-6
      DO 3 I=1,N2
3    H(I,I+2)=H2(I)
      TL=1.D-6
      IF(NT.NE.0)TL=1.D-10
      GO TO (200,300,100),NXZ
100  DO 20 I=1,N
20    H(I,I)=H0(I)+AZ*JZ(I)
      DO 21 I=1,N1
21    H(I,I+1)=H1(I)+AX*JX(I)
101  CALL SIGMA
      FX=FQ(SX)
      FZ=FW(SZ)
      IF(DABS(FX).LE.TL.AND.DABS(FZ).LE.TL)RETURN
      DO 30 I=1,N
30    H(I,I)=H(I,I)+D*JZ(I)
      AZ=AZ+D
      CALL SIGMA
      FX1=FQ(SX)
      FZ1=FW(SZ)
      DO 40 I=1,N
40    H(I,I)=H(I,I)-D*JZ(I)
      AZ=AZ-D
      DO 41 I=1,N1
41    H(I,I+1)=H(I,I+1)+D*JX(I)
      AX=AX+D
      CALL SIGMA

```

```

FX2=FQ(SX)
FZ2=FW(SZ)
AX=AX-D
FXZ=(FX1-FX)/D
FXX=(FX2-FX)/D
FZX=(FZ2-FZ)/D
FZZ=(FZ1-FZ)/D
DEN=FXX*FZ-FZX*FZX
D2=(FXZ*FZ-FZZ*FX)/DEN
D1=(FZX*FX-FXX*FZ)/DEN
AX=AX+D2
AZ=AZ+D1
GO TO 100
200 DO 70 I=1,N
70 H(I,I)=H0(I)
201 DO 71 I=1,N1
71 H(I,I+1)=H1(I)+AX*JX(I)
CALL SIGMA
FX=FQ(SX)
IF(DABS(FX),LE,TL)RETURN
DO 72 I=1,N
72 H(I,I+1)=H(I,I+1)+D*JX(I)
AX=AX+D
CALL SIGMA
FX1=FQ(SX)
D1=D*FX/(FX-FX1)
AX=AX+D1-D
GO TO 201
300 DO 80 I=1,N1
80 H(I,I+1)=H1(I)
301 DO 81 I=1,N
81 H(I,I)=H0(I)+AZ*JZ(I)
CALL SIGMA
FZ=FW(SZ)
IF(DABS(FZ),LE,TL)RETURN
AZ=AZ+D
DO 82 I=1,N
82 H(I,I)=H(I,I)+D*JZ(I)
CALL SIGMA
FZ1=FW(SZ)
D1=D*FZ/(FZ-FZ1)
AZ=AZ+D1-D
GO TO 301
END

```

```

C CALCULATION OF MAGNETIZATION AND THERMODYNAMIC FUNCTIONS
SUBROUTINE SIGMA
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/SHBLK/SX,SZ,HX,HZ,AX,AZ,U,F,Z/DIABLK/E(17),EX(17),A(17,17)
1/HAMBLK/H(17,17)/MISBLK/T,J,N,N1,N2,N6/JBLK/JZ(17),W(51),JX(16)
1,DV(42)
DIMENSION XP(17),ZP(17),G(17)
CALL TRED
CALL TQL
DO 10 I=1,N
S1=0
S2=0
DO20K=1,N
20 S1=S1+JZ(K)*A(K,I)**2
ZP(I)=-S1/J
DO 30 K=1,N1
30 S2=S2+JX(K)*A(K,I)*A(K+1,I)
10 XP(I)=-2*S2/J
S1=0
S2=0
S3=0
S4=0
DO 40 I=1,N
V=DEXP((E(1)-E(I))/T)

```

```

EX(I)=V
S1=S1+V
S2=S2+E(I)*V
S3=S3+ZP(I)*V
40 S4=S4+XP(I)*V
Z=S1
U=S2/S1
SX=S4/S1
SZ=S3/S1
F=E(I)-T*DLOG(Z)
IF(DABS(SX).LT.1.D-10)SX=0
IF(DABS(SZ).LT.1.D-10)SZ=0
RETURN
END

C CALC. OF FIRST AND SECOND ORDER ENERGY CORRECTIONS
SUBROUTINE ENCOR(NXZ)
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/JBLK/JZ(17),J2(17),J4(17),J6(17),JX(16),J21P(16),J22P(15),
1J66P(11)/DIABLK/E(17),EX(17),A(17,17)/CRBLK/DIV(153),ET(23,17)/MI
1SBLK/T,J,N,N1,N2,N6/SBLK/SX,SZ,HX,HZ,AX,AZ,U,F,Z
DIMENSION JA(153),JB(153),JC(153),JD(153),JE(153),JP(153),JQ(153)
DIV(1)=0
DO 10 K=2,N
M=(K*(K-1))/2
L=K-1
DIV(K+M)=0
DO 10 I=1,L
10 DIV(I+M)=1/(E(I)-E(K))
DO 20 K=1,N
M=(K*(K-1))/2
DO 21 I=1,K
IK=I+M
S1=0
S2=0
S3=0
S4=0
S5=0
S6=0
S7=0
DO 22 L=1,N
P=A(L,I)*A(L,K)
IF(NXZ.NE.1)S1=S1+P*JZ(L)
22 S2=S2+P*J2(L)
JA(IK)=S2
IF(NXZ.NE.1)JQ(IK)=S1
DO 23 L=1,N1
P=A(L,I)*A(L+1,K)
Q=A(L+1,I)*A(L,K)
IF(NXZ.NE.2)S3=S3+JX(L)*(P+Q)
S4=S4+J21P(L)*(P+Q)
23 S5=S5+J21P(L)*(Q-P)
IF(NXZ.NE.2)JP(IK)=S3
JD(IK)=S4
JE(IK)=S5
DO 24 L=1,N2
P=A(L,I)*A(L+2,K)
Q=A(L+2,I)*A(L,K)
S6=S6+J22P(L)*(P+Q)
24 S7=S7+J22P(L)*(Q-P)
JB(IK)=S6
21 JC(IK)=S7
ET(1,K)=S2
ET(2,K)=S6
ET(3,K)=S4
IF(NXZ.NE.2)ET(4,K)=S3
IF(NXZ.NE.1)ET(5,K)=S1
20 CONTINUE
CALL COR1(6,JA)
CALL COR1(11,JB)

```

```

CALL COR1 (15,JD)
CALL COR1 (21,JC)
CALL COR1 (23,JE)
  IF(NXZ.NE.2)CALL COR1 (18,JP)
  IF(NXZ.NE.1)CALL COR1 (20,JQ)
CALL COR2 (7,JA,JB)
CALL COR2 (8,JA,JD)
  IF(NXZ.NE.2)CALL COR2 (9,JA,JP)
  IF(NXZ.NE.1)CALL COR2 (10,JA,JQ)
CALL COR2 (12,JB,JD)
  IF(NXZ.NE.2)CALL COR2 (13,JB,JP)
  IF(NXZ.NE.1)CALL COR2 (14,JB,JQ)
  IF(NXZ.NE.2)CALL COR2 (16,JD,JP)
  IF(NXZ.NE.1)CALL COR2 (17,JD,JQ)
  IF(NXZ.EQ.3)CALL COR2 (19,JP,JQ)
CALL COR2 (22,JC,JE)
C      DO 30' A=6,23
C      DO 30' K=1,17
C 30  EI(1,K)=0.
      RETURN
      END

C      DERCAL,COR1,COR2,FUN1,FUN2,FUN3,FUN4,FUN5,FUN6
C SECOND DERIVS. OF INTERNAL ENERGY
SUBROUTINE DERCAL
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,Q-Z)
COMMON/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),SE(10,2)/MISBLK/T,D1(3)/SHBLK/D2(6)
1,U,F,Z/DERBLK/D(18),C(18),B(18)
U1=1+U/T
T2=T*T
D(1)=F1(1,1)
D(6)=F1(6,2)
D(10)=F1(10,3)
D(13)=F1(13,4)
D(15)=F1(15,5)
D(16)=2*(SD(16,1)*U1-SD(16,2)/T)
D(18)=2*(SD(18,1)*U1-SD(18,2)/T)
D(2)=F2(2,1,2,1)
D(3)=F2(3,1,3,2)
D(4)=F2(4,1,4,3)
D(5)=F2(5,1,5,4)
D(7)=F2(7,2,3,5)
D(8)=F2(8,2,4,6)
D(9)=F2(9,2,5,7)
D(11)=F2(11,3,4,8)
D(12)=F2(12,3,5,9)
D(14)=F2(14,4,5,10)
D(17)=SD(17,1)*U1-SD(17,2)/T
C(1)=F3(1,1)
C(6)=F3(6,2)
C(10)=F3(10,3)
C(13)=F3(13,4)
C(15)=F3(15,5)
  C(16)=2*SD(16,1)
  C(18)=2*SD(18,1)
C(2)=F4(2,1,2,1)
C(3)=F4(3,1,3,2)
C(4)=F4(4,1,4,3)
C(5)=F4(5,1,5,4)
C(7)=F4(7,2,3,5)
C(8)=F4(8,2,4,6)
C(9)=F4(9,2,5,7)
C(11)=F4(11,3,4,8)
C(12)=F4(12,3,5,9)
C(14)=F4(14,4,5,10)
C(17)=SD(17,1)
B(1)=F5(1,1)
B(6)=F5(6,2)
B(10)=F5(10,3)
B(13)=F5(13,4)

```

```

B(15)=F5(15,5)
B(16)=2*SD(16,1)
B(18)=2*SD(18,1)
B(2)=F6(2,1,2,1)
B(3)=F6(3,1,3,2)
B(4)=F6(4,1,4,3)
B(5)=F6(5,1,5,4)
B(7)=F6(7,2,3,5)
B(8)=F6(8,2,4,6)
B(9)=F6(9,2,5,7)
B(11)=F6(11,3,4,8)
B(12)=F6(12,3,5,9)
B(14)=F6(14,4,5,10)
B(17)=SD(17,1)
RETURN
END
REAL*8FUNCTION F1(L,M)
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),SE(10,2)/SHBLK/D(6),U,F,Z/MISBLK/
IT,J,N1,N2,N3,N4
U1=1+U/T
T2=T*T
F1 =2*(SD(L,1)*U1-SD(L,2)/T+(SC(M,1)**2*U1-SC(M,2))/T-SC(M,1)
1*SC(M,3)/T2+(SC(M,4)-U*SC(M,2))/(2*T2))
RETURN
END
REAL*8FUNCTION F2(L,M,N,K)
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),SE(10,2)/SHBLK/D(6),U,F,Z/MISBLK/
IT,J,N1,N2,N3,N4
U1=1+U/T
T2=T*T
F2 =SD(L,1)*U1-SD(L,2)/T+2*(SC(M,1)*SC(N,1)*U1-SE(K,1))/T
1-(SC(M,1)*SC(N,3)+SC(N,1)*SC(M,3))/T2+(SE(K,2)-SE(K,1)*U)/T2
RETURN
END
REAL*8FUNCTION F3(L,M)
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),SE(10,2)/SHBLK/D(6),U,F,Z/MISBLK/
IT,J,N1,N2,N3,N4/UBLK/U2
F3=((SC(M,3)-SC(M,1)*U)**2/(U2-U**2)-SC(M,2)+SC(M,1)**2)/T+
1 2*SD(L,1)
RETURN
END
REAL*8FUNCTION F4(L,M,N,K)
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),SE(10,2)/SHBLK/D(6),U,F,Z/MISBLK/
IT,J,N1,N2,N3,N4/UBLK/U2
F4=((SC(M,3)-SC(M,1)*U)*(SC(N,3)-SC(N,1)*U)/(U2-U**2)-SE(K,1)+
1 SC(M,1)*SC(N,1))/T +SD(L,1)
RETURN
END
REAL*8FUNCTION F5(L,M)
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),SE(10,2)/SHBLK/D(6),U,F,Z/MISBLK/
IT,J,N1,N2,N3,N4/UBLK/U2
F5= 2*SD(L,1)-(SC(M,2)-SC(M,1)**2)/T
RETURN
END
REAL*8FUNCTION F6(L,M,N,K)
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),SE(10,2)/SHBLK/D(6),U,F,Z/MISBLK/
IT,J,N1,N2,N3,N4/UBLK/U2
F6=SD(L,1)-(SE(K,1)-SC(M,1)*SC(N,1))/T
RETURN
END
C SECOND ORDER CORRECTIONS FOR EQUAL OPERATORS
SUBROUTINE COR1(M,J)
IMPLICIT REAL *8(A-H,J,O-Z)
COMMON/CRBLK/DIV(153),ET(43,17)/MISBLK/T,Q,N,N1,N2,N6

```

```

      DIMENSION J(153)
      DO 10 I=1,N
      S=0
      IF(I.EQ.1)GO TO 11
      L=I-1
      DO 12 K=1,L
      MK=K+(I*(I-1))/2
12  S=S+DIV(MK)*J(MK)**2
11  CONTINUE
      IF(I.EQ.N)GO TO 13
      L=I+1
      DO 14 K=L,N
      MK=1+(K*(K-1))/2
14  S=S+DIV(MK)*J(MK)**2
13  ET(M,I)=S
10  CONTINUE
      RETURN
      END

```

C SECOND ORDER ENERGY CORRECTIONS FOR UNEQUAL OPERATORS

```

      SUBROUTINE COR2(M,J1,J2)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
      COMMON/CRBLK/DIR(153),ET(23,17)/MISBLK/T,J,N,N1,N2,N6
      DIMENSION J1(153),J2(153)
      DO 10 I=1,N
      S=0
      IF (I,EQ.1)GO TO 11
      L=I-1
      DO 12 K=1,L
      MK=K+(I*(I-1))/2
12  S=S+DIV(MK)*J1(MK)*J2(MK)
11  CONTINUE
      IF(I,EQ,N)GO TO 13
      L=I+1
      DO 14 K=L,N
      MK=1+(K*(K-1))/2
14  S=S+DIV(MK)*J1(MK)*J2(MK)
13  ET(M,I)=2*S
10  CONTINUE
      RETURN
      END

```

C CALC. OF EQUILIBRIUM SUMS

```

      SUBROUTINE SUMCAL
      IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
      COMMON/SHBLK/DA(6),U,F,Z/CRBLK/DB(153),ET(23,17)/DIABLK/E(17),
1  EX(17),DC(289)/MISBLK/T,J,N,N1,N2,N6/SUMBLK/SC(5,4),SD(18,2),
1  SE(10,2)/FIRST/UA,UB,UD,UP,UQ/UBLK/U2
      DO 10 I=1,5
      S1=0
      S2=0
      S3=0
      S4=0
      DO 11 K=1,N
      X=ET(I,K)
      Y=X*X
      W=E(K)
      V=EX(K)
      S1=S1+V*X
      S2=S2+V*Y
      S3=S3+V*W*X
11  S4=S4+V*W*Y
      SC(1,1)=S1/Z
      SC(1,2)=S2/Z
      SC(1,3)=S3/Z
10  SC(1,4)=S4/Z
      DO 20 I=1,18
      L=I+5
      S1=0
      S2=0
      DO 21 K=1,N

```



```

X=ET(L,K)
V=EX(K)
S1=S1+V*X
21 S2=S2+V*X*E(K)
SD(1,1)=S1/Z
20 SD(1,2)=S2/Z
LL=0
DO 30 I=1,4
M=I+1
DO 30 K=M,5
LL=LL+1
S1=0
S2=0
DO 31 L=1,N
V=EX(L)
W=ET(I,L)*ET(K,L)
S1=S1+V*W
31 S2=S2+V*W*E(L)
SE(LL,1)=S1/Z
30 SE(LL,2)=S2/Z
UA=SC(1,1)
UB=SC(2,1)
UD=SC(3,1)
UP=SC(4,1)
UQ=SC(5,1)
S1=0
DO 35 L=1,N
35 S1=S1+EX(L)*E(L)**2
U2=S1/Z
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE STD
IMPLICIT REAL*8(A-H,J,O-Z)
COMMON/CBLK/C1A,C2A,CG,CE/BBLK/B1A,B2A,BG,BE/GBLK/Q,GX,GZ
1 /G2BLK/G1A0,G2A0,G1A2,G2A2,GG/MISBLK/T,J,N,N1,N2,N6
1 /PBLK/P2,P4,P6,P66
J=6
G=1.5
Q=G*6.718736415D-2
GX=94.5
GZ=94.5
P2=1.08
P4=-4.E-4
P6=1.0E-7
P66=2.0E-6
C1A=90080.0532
C2A=19433.6117
CG=52054.8673
CE=51916.2391
G1A0=9.02
G1A2=0
G2A0=8.97
G2A2=0
GG=0
GE=0
B1A=-7.93
B2A=-8.06
BG=15.66
BE=2.35*BG
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE PNT(N)
GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9),N
1 TYPE 10
10 FORMAT(/' ENTER J'/)
RETURN
2 TYPE 20
20 FORMAT(/' ENTER G, GX, GZ'/)

```

```

      RETURN
3     TYPE 30
30    FORMAT(/' ENTER P2, P4, P6, P66'/)
      RETURN
4     TYPE 40
40    FORMAT(/' ENTER C1A, C2A, CG, CE'/)
      RETURN
5     TYPE 50
50    FORMAT(/' ENTER B1A, B2A, BG, BE'/)
      RETURN
6     TYPE 60
60    FORMAT(/' ENTER G1A0, G2A0, G1A2, G2A2, GG, GE'/)
      RETURN
7     TYPE 70
70    FORMAT(/' ENTER T0, DT, NT, HQ, DH, NH, NXZ, NC, TL'/)
      RETURN
8     TYPE 80
80    FORMAT(/' ENTER INPUT FILENAME(5LETTERS) <CR>
      1 OUTPUT FILENAME(6LETTERS)')
      RETURN
9     TYPE 90
90    FORMAT(/' ENTER NC,TL')
      RETURN
      END

      SUBROUTINE 152(S,F)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      IF (S.LT.1.D-3)GO TO 20
      X0=3.+S
10    V=DEXP(-2.D0*X0)
      C=(1.D0+V)/(1.D0-V)-1.D0/X0-S
      D=1.D0/X0**2-4.D0*V/((1.D0-V)**2)
      DEL=-C/D
      X0=X0+DEL
      IF(1.D-10.LT.(DABS(DEL)/X0))GO TO 10
      F=1.D0-3.D0*S/X0
      RETURN
20    F=0.6D0*S**2
      RETURN
      END

C     FDER
C     CRIA OUTPUT FILE NA SEGUINTE CONFIGURACAO:
C     H/SIGMA/UA/UB/UPQ/E1A/E4A/EG
C     UAA/UAB/UAPQ/UBB/UBPQ/UDD/UPP/UCC/UEE
C     UAA/UAB/UAPQ/UBB/UBPQ/UDD/UPP/UCC/UEE
C     UAA/UAB/UAPQ/UBB/UBPQ/UDD/UPP/UCC/UEE
C     ONDE AS ULTIMAS 3 LINHAS SE REFEREM AO CALCULO DAS DERIVADAS
C     DE U A T CONSTANTE, A S CONSTANTE E DE F A T CONSTANTE.
      SUBROUTINE FDER(I,J,K,NH,NFL)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON/FIRST/UF(5)/FRDER/NXZ,NT,D(25,5),H(25),SP(25),EP(4,25)
      1/MISBLK/T,R,NM(4)/DRBLK/X(18,25,3)/DSIBLK/DERSA(25,3),
      1DERSB(25,3),DERSP(25,3),DERSQ(25,3)
      GO TO (100,400,400,400,500,600,700),I
100   TYPE 110
110   FORMAT(/'   FILENAME??')
      ACCEPT120,J
120   FORMAT(A5)
      RETURN
C 200  WRITE(1,210) NXZ,NT
210   FORMAT(2G)
      RETURN
C 300  WRITE(1,310) T,NH
310   FORMAT(F6.0,5X,16)
      RETURN
400   IF(K.NE.1) GO TO 500
      DO 410 L=1,5
410   D(1,L) = UF(L)
      RETURN

```

```

500 DO 510 L=1,5
510 D(K,L)=UF(L)-D(1,L)
RETURN
600 WRITE(6,610)
610 FORMAT(1H1,' H ',5X,'UA ',11X,'UB ',11X,'UD ',11X,'UP ',11X
1,'UQ '/')
DO 630 L=1,NH
WRITE(6,620) H(L),(D(L,M),M=1,5)
620 FORMAT(F6.0,1P5D14.5)
630 CONTINUE
IF(NFL.EQ.2) RETURN
IF(NXZ.EQ.1) WRITE(1,640)(H(M),SP(M),D(M,1),D(M,2),D(M,4),
1(EP(N,M),N=1,3),M=1,NH)
640 FORMAT(OPF6.0,F12.6,1P6E)
IF(NXZ.EQ.2) WRITE(1,650)(H(M),SP(M),D(M,1),D(M,2),D(M,5),
1(EP(N,M),N=1,2),M=1,NH)
650 FORMAT(OPF6.0,F12.6,1P5E)
IF(NFL.NE.3) RETURN
DO 655 K=1,3
WRITE(1,643)
643 FORMAT(/)
IF(NXZ.EQ.1) WRITE(1,645) (X(1,M,K),X(2,M,K),X(4,M,K),
1X(6,M,K),X(8,M,K),X(10,M,K),X(13,M,K),X(16,M,K),X(18,M,K),
2 M=1,NH)
645 FORMAT(2X,9(E14.7,1X))
IF(NXZ.EQ.2) WRITE(1,645) (X(1,M,K),X(2,M,K),X(5,M,K),
1X(6,M,K),X(9,M,K),X(10,M,K),X(15,M,K),X(16,M,K),X(18,M,K),
2 M=1,NH)
655 CONTINUE
RETURN
700 TYPE 710
710 FORMAT(/' MAKE FILE OF (1ST,2ND) DERIVS? 1=(Y,N) 2=(N,N)
1 3=(Y,Y)')
ACCEPT 720,NFL
720 FORMAT(1G)
IF(NFL.NE.2) GO TO 100
RETURN
END

C SUBROTINA ACBRE.
C CORRECAO DAS DERIVADAS DE 2A ORDEM DEVIDO A DEPENDENCIA
C DA MAGNETIZACAO COM AS DEFORMACOES.
SUBROUTINE ACBRE(J,GX,GZ,NH)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,J,O-Z)
COMMON/FRDER/NXZ,NT,FDR(25,5),HP(25),SP(25),EP(4,25)/
1DRBLK/DEP(18,25,3)/DSIBLK/DERSA(25,3),DERSB(25,3)
1,DERSP(25,3),DERSQ(25,3)
WRITE(7,150)
C DO 10 IA=1,18
C DO 10 IB=2,25
C DO 10 IC=1,3
C DEP(IA,IB,IC)=DEP(IA,IB,IC)+DEP(IA,1,IC)
C10 CONTINUE
C CALL JOTAS(J,NH)
GO TO (100,200)NXZ
100 DO 110 K=1,3
DO 110 I=1,NH
DESA(I,K)=(-DEP(4,I,K))/(J+GX*DEP(13,I,K))
DESB(I,K)=(-DEP(8,I,K))/(J+GX*DEP(13,I,K))
DESP(I,K)=(-DEP(13,I,K))/(J+GX*DEP(13,I,K))
110 CONTINUE
150 FORMAT(/,10X,' DESA ',15X,' DESB ',15X,' DERSPO ',/)
WRITE(7,151)(DESA(I,3),DESB(I,3),DESP(I,3),I=1,NH)
151 FORMAT(3(10X,1PD12.3))
DO 120 K=1,3
DO 120 IJ=1,NH
DEP(1,IJ,K)=DEP(1,IJ,K)+GX*DEP(4,IJ,K)*DESA(IJ,K)-
1J*GX*(DESA(IJ,K)**2)
DEP(2,IJ,K)=DEP(2,IJ,K)+GX*DEP(8,IJ,K)*DESA(IJ,K)-
1J*GX*DESA(IJ,K)*DESB(IJ,K)

```

```

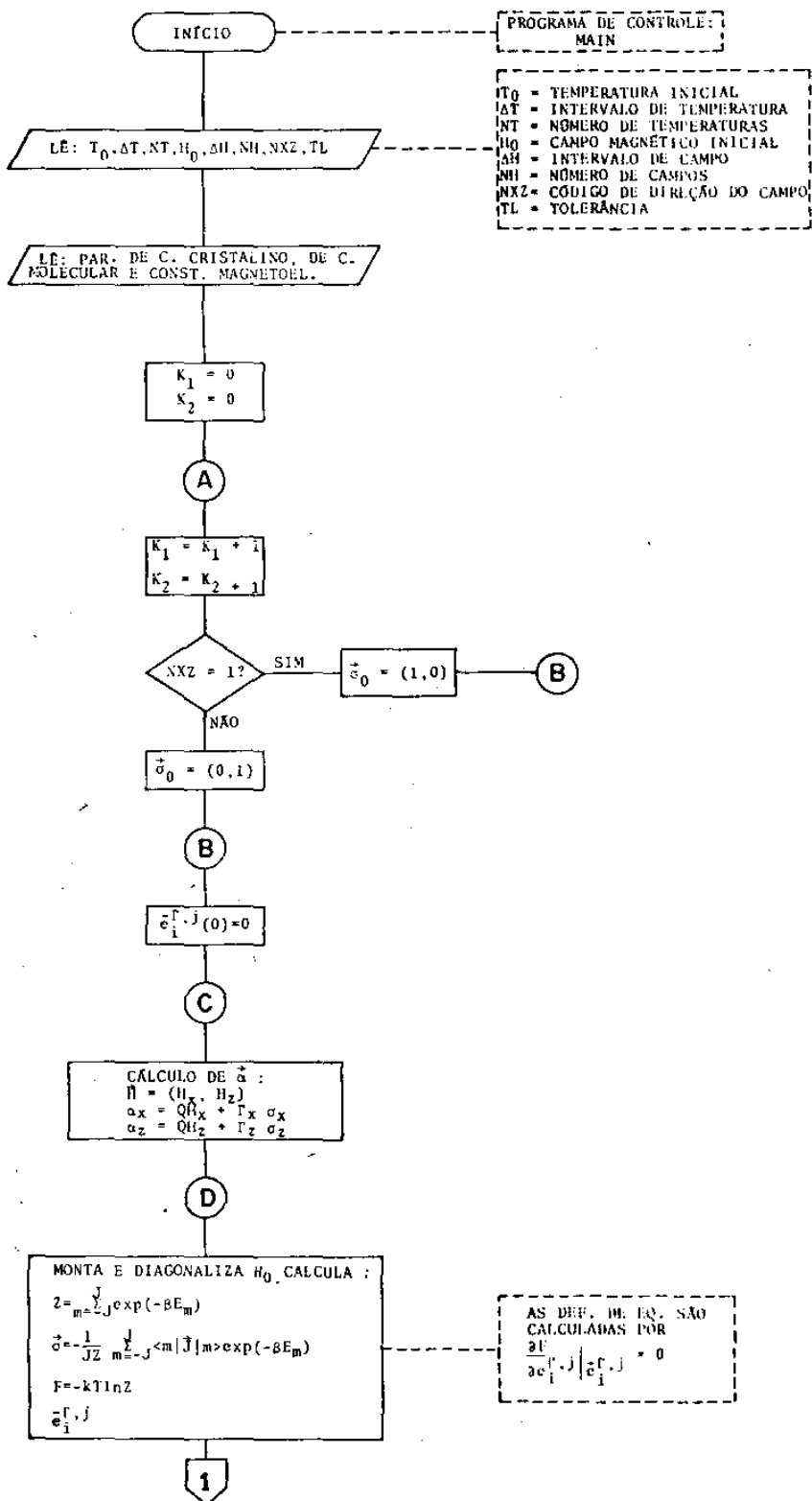
DEP(6,IJ,K)=DEP(6,IJ,K)+GX*DEP(8,IJ,K)*DERSB(IJ,K)-
1J*GX*(DERSB(IJ,K)**2)
DEP(4,IJ,K)=(DEP(4,IJ,K)*(1+GX*DERSP(IJ,K))-J*GX*DERSA(IJ,K)*
1DERSP(IJ,K))*J*SP(IJ)
DEP(8,IJ,K)=(DEP(8,IJ,K)*(1+GX*DERSP(IJ,K))-J*GX*DERSB(IJ,K)*
1DERSP(IJ,K))*J*SP(IJ)
DEP(13,IJ,K)=(DEP(13,IJ,K)*(1+GX*DERSP(IJ,K))-J*GX*(DERSP
1(IJ,K)**2))*J*J*SP(IJ)*SP(IJ)
120 CONTINUE
GO TO 300
200 DO 410 K=1,3
DO 210 I=1,NH
DERSA(I,K)=(-DEP(5,I,K))/(J+GZ*DEP(15,I,K))
DERSB(I,K)=(-DEP(9,I,K))/(J+GZ*DEP(15,I,K))
DERSQ(I,K)=(-DEP(15,I,K))/(J+GZ*DEP(15,I,K))
210 CONTINUE
WRITE(7,151)(DERSA(I,3),DERSB(I,3),DERSQ(I,3),I=1,NH)
DO 220 K=1,3
DO 220 IJ=1,NH
DEP(1,IJ,K)=DEP(1,IJ,K)+GZ*DEP(5,IJ,K)*DERSA(IJ,K)-
1J*GZ*(DERSA(IJ,K)**2)
DEP(2,IJ,K)=DEP(2,IJ,K)+GZ*DEP(9,IJ,K)*DERSA(IJ,K)-
1J*GZ*(DERSA(IJ,K)*DERSB(IJ,K))
DEP(6,IJ,K)=DEP(6,IJ,K)+GZ*DEP(9,IJ,K)*DERSB(IJ,K)-
1J*GZ*(DERSB(IJ,K)**2)
DEP(5,IJ,K)=(DEP(5,IJ,K)*(1+GZ*DERSQ(IJ,K))-
1J*GZ*DERSA(IJ,K)*DERSQ(IJ,K))*J*SP(IJ)
DEP(9,IJ,K)=(DEP(9,IJ,K)*(1+GZ*DERSQ(IJ,K))-J*GZ*DERSB(IJ,K)*
1DERSQ(IJ,K))*J*SP(IJ)
DEP(15,IJ,K)=(DEP(15,IJ,K)*(1+GZ*DERSQ(IJ,K))-
1J*GZ*(DERSQ(IJ,K)**2))*J*J*SP(IJ)*SP(IJ)
220 CONTINUE
C300 DO 310 IA=1,18
C DO 310 IB=2,25
C DO 310 IC=1,3
C310 DEP(IA,IB,IC)=DEP(IA,IB,IC)-DEP(IA,1,IC)
300 RETURN
END

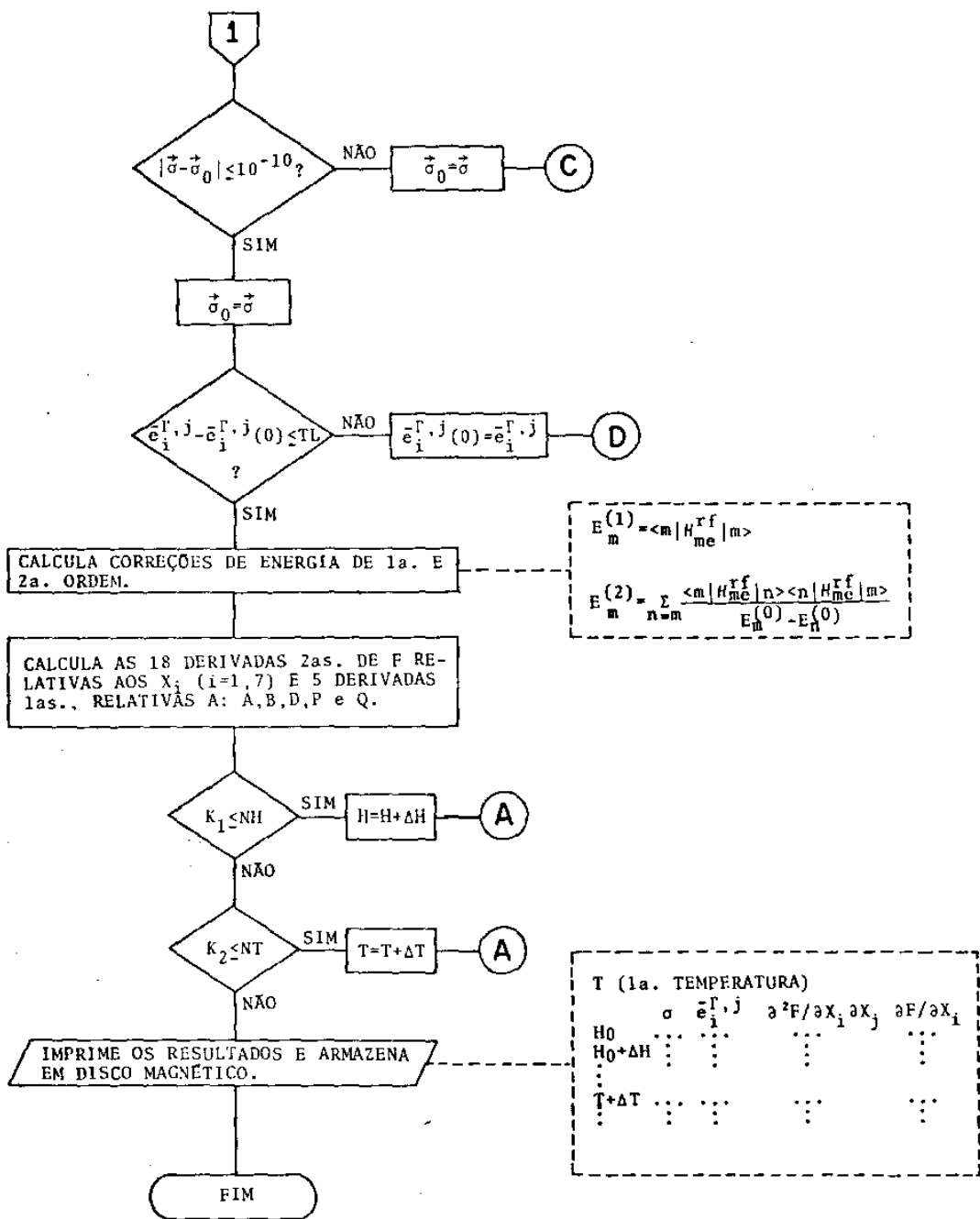
```

```

C FICOR
C SUBROTINA QUE CORRIGE AS DERIVADAS PRIMEIRAS
C DE F, PARA INCLUIR A DEPENDENCIA DA MAGNETIZACAO COM AS
C DEFORMACOES.
SUBROUTINE FICOR(J,GX,GZ,NH)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,J,O-Z)
COMMON/ FICOR/NXZ,NT,D(25,5),H(25),SP(25),EP(4,25)
1/DSIBLK/DERSA(25,3),DERSB(25,3),DERSP(25,3),DERSQ(25,3)
DO 10 K=2,NH
DO 10 L=1,5
10 D(K,L)=D(K,L)+D(1,L)
DO 20 K=1,NH
DO 20 L=1,5
IF(L.EQ.1)D(K,L)=D(K,L)-J*GX*SP(K)*DERSA(K,3)
IF(L.EQ.2)D(K,L)=D(K,L)-J*GX*SP(K)*DERSB(K,3)
IF(L.EQ.4)D(K,L)=D(K,L)-J*GX*SP(K)*DERSP(K,3)
20 IF(L.EQ.5)D(K,L)=D(K,L)-J*GZ*SP(K)*DERSQ(K,3)
DO 30 K=1,NH
DO 30 L=1,5
30 IF(L.EQ.4.OR.L.EQ.5)D(K,L)=D(K,L)+J*SP(K)
DO 40 K=2,NH
DO 40 L=1,5
40 D(K,L)=D(K,L)-D(1,L)
RETURN
END

```





Relação entre as grandezas da teoria e as dos programas
de computador:

TEORIA	PROGRAMAS
C_1^α	C1A
C_2^α	C2A
C_{12}^α	0
C^γ	CG
C^ϵ	CE
$e^{\alpha,1}$	E1A
$e^{\alpha,2}$	E2A
e_1^γ	E1G
$B_1^{\alpha,2}$	B1A
$B_2^{\alpha,2}$	B2A
$B^{\gamma,2}$	BG
$B^{\epsilon,2}$	BE
$G_1^{\alpha,0}$	G1A0
$G_2^{\alpha,0}$	G2A0
$G_1^{\alpha,2}$	G1A2
$G_2^{\alpha,2}$	G2A2
G^γ	0
G^ϵ	0
$Q_2^0(\vec{J})$	$\sqrt{2/3}J_2$
$Q_4^0(\vec{J})$	$\sqrt{2/35}J_4$
$Q_6^0(\vec{J})$	$\sqrt{4/231}J_6$
$Q_{21}^+(\vec{J})$	J21P
$Q_{22}^+(\vec{J})$	J22P
$Q_{66}^+(\vec{J})$	J66P

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1- E.A. Nesbit e J.H. Wernick, "Rare Earth Permanent Magnets", Materials Science Series, Academic Press (1973).
- 2- M.P. Maley, P.L. Donoho e H.A. Blackstead, J. Appl. Phys. 37, 1006 (1966).
- 3- A.E. Clark e H.S. Belson, Phys. Rev. B5, 3642 (1972).
- 4- B.T. Matthias, E. Corenzwit, J.M. Vandenberg e H.E. Barz, Proc. Nat. Acad. Sci. USA 74, 1534 (1977).
- 5- M. Ishikawa e Ø. Fisher, S. State Comm. 25, 37 (1977).
- 6- A.H. Bobeck, P.I. Bonyhard e J.E. Geusic, Proc. IEEE 63, 1176 (1975).
- 7- A.H. Morrish, "The Physical Principles of Magnetism", John Wiley (1965).
- 8- J.J. Rhyne, em "Magnetic Properties of Rare Earth Metals" editado por R.J. Elliott, Plenum Press (1972), pg. 129.
- 9- S. Gama, B.M. Kale, M.S. Torikachvili, O. Ferreira, M. Arellano, D.G. Pinatti e P.L. Donoho, AIP Conf. Proc. 29, 596 (1975).
- 10- W.P. Mason, Phys. Rev. 82, 715 (1951).
- 11- H. Gobrecht, Ann. Phys., Lpz., 28, 673 (1937).
- 12- W.C. Koehler, em "Magnetic Properties of Rare Earth Metals" editado por R.J. Elliott, Plenum Press (1972), pg. 81.
- 13- C.D. Graham, J. Phys. Soc. Japan 16, 1310 (1962).
- 14- H. Umebayashi, G. Shirane e B.C. Frazer, Phys. Rev. 165, 688 (1968).
- 15- M. Atoji, S. State Comm. 14, 1047 (1974).
- 16- E.R. Callen e H.B. Callen, J. Phys. Chem. Solids 16, 310 (1960).
- 17- H.B. Callen e S. Shtrikman, S. State Comm. 3, 5 (1965).
- 18- H.B. Callen e E.R. Callen, J. Phys. Chem. Solids 27, 127 (1966).

- 19- J.J. Rhyne e A.E. Clark, J. Appl. Phys. 38, 1379 (1967).
- 20- J.L. Feron, G. Huy e R. Pauthenet, "Les Elements des Terres Rares II", 17 (Coloques Inter. du C.N.R.S. N° 180, 1970)
- 21- E.R. Callen e H.B. Callen, Phys. Rev. 129, 578 (1963).
- 22- E.R. Callen e H.B. Callen, Phys. Rev. 139, A455 (1965).
- 23- E.R. Callen, J. Appl. Phys. 39, 519 (1968).
- 24- A.E. Clark, B.F. DeSavage e R. Bozorth, Phys. Rev. 138, A216 (1965).
- 25- J.J. Rhyne e S. Legvold, Phys. Rev. 138, A507 (1965).
- 26- F.J. Darnell, Phys. Rev. 130, 1825 (1963).
- 27- F.J. Darnell, Phys. Rev. 132, 1098 (1961).
- 28- J. Alstad e S. Legvold, J. Appl. Phys. 35, 1752 (1964).
- 29- J.J. Rhyne e S. Legvold, Phys. Rev. 140, A2145 (1965).
- 30- J.J. Rhyne, S. Legvold e E.T. Rodine, Phys. Rev. 154, 266 (1967).
- 31- K. Salama, F.R. Brotzen e P.L. Donoho, J. Appl. Phys. 43, 3254 (1972).
- 32- K. Salama, C.L. Melcher e P.L. Donoho, IEEE Ultrasonics Symposium Proc., 309 (1973).
- 33- S.B. Palmer, J. Phys. Chem. Solids 37, 1069 (1976).
- 34- M. Long Jr., A.R. Wazzan e V.R. Stern, Phys. Rev. 178, 755 (1969).
- 35- M. Rosen, D. Kalir e H. Klimker, Phys. Rev. 38, 4399 (1973).
- 36- K. Salama, F.R. Brotzen e P.L. Donoho, J. Appl. Phys. 44, 180 (1973).
- 37- S. Gama, Tese de Mestrado, UNICAMP (1975), não publicada.
- 38- B.M. Kale, Tese de Doutorado, Rice University (USA) (1976), não publicada.
- 39- B.W. Southern e D.A. Goodings, Phys. Rev. B7, 534 (1973).
- 40- R.R. Rao e A. Ramanand, J. Phys. Chem. Solids 38, 1035 (1977).

- 41- J.E. May Jr., IRE Nat. Conv. Rec. 6, Pt. 2, 134 (1958).
- 42- E.P. Papadakis, J. Appl. Phys. 35, 1474 (1964).
- 43- D.H. Chung, D.J. Silversmith e B.B. Chick, Rev. Sci. Instrum. 40, 718 (1969).
- 44- H.J. McSkimin, J. Acoust. Soc. Am. 33, 12 (1961).
- 45- "An Introduction to Piezoelectric Transducers", Valpey-Fisher Corporation (1972).
- 46- H.B. Huntington, em "Solid State Physics" vol. 7, pg. 214, editado por F. Seitz e D. Turnbull, Academic Press (1958).
- 47- J.D. Jackson, "Classical Electrodynamics", John Wiley (1962).
- 48- H. Watanabe, "Operator Methods in Ligand Field Theory", Prentice Hall (1966).
- 49- T. Kasuya, em "Magnetism IIB", pg. 215, editado por Rado e Suhl, Academic Press (1966).
- 50- P.L. Donoho, a ser publicado.
- 51- B.M. Kale, M.S. Torikachvili, J.C. Koo e P.L. Donoho, a ser publicado.
- 52- R.L. Melcher, em "Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi'", Varenna, curso LII, editado por E. Burnstein, Academic (1971), pg. 257.
- 53- L. Bonsall e R.L. Melcher, Phys. Rev. B14, 1128 (1976).
- 54- V. Dohm e P. Fulde, Z. Physik B21, 369 (1975).
- 55- W.F. Brown Jr., J. Appl. Phys. 36, 994 (1965).
- 56- M.A. Ruderman e C. Kittel, Phys. Rev. 96, 99 (1954).
- 57- T. Kasuya, Progr. Theoret. Phys. 16, 45 (1956).
- 58- K. Yosida, Phys. Rev. 106, 893 (1957).
- 59- B.R. Cooper, em "Solid State Physics" vol. 21, pg. 393, editado por F. Seitz, D. Turnbull e H. Ehrenreich, Academic Press (1968).
- 60- J. Jensen, J.G. Houmann e H.B. Møller, Phys. Rev. B12, 303 (1975).

- 61- P.A. Lindgard, Phys. Rev. Letters 36, 385 (1976).
- 62- K.W.H. Stevens, Proc. Phys. Soc. (London) A65, 209 (1952).
- 63- J.C. Gourdon, B. Vigouroux e J. Pescià, Arch. Sci. (Switzerland) 27, 249 (1974).
- 64- R.J. Pollina e B. Luthi, Phys. Rev. 177, 841 (1969).
- 65- S. Mackawa, R.A. Treder, M. Tachiki, M.C. Lee e M. Levy, Phys. Rev. B13, 1284 (1976).
- 66- D.E. Hegland, S. Legvold e F.H. Spedding, Phys. Rev. 131, 158 (1963).
- 67- F.S. Acton, "Numerical Methods that 'Usually' Work", Harper & Row (1970)
- 68- R. Alconard, P. Boutron e D. Bloch, J. Phys. Chem. Solids 30, 2277 (1969).
- 69- P.V. duPlessis, Philosophical Magazine, 145 (1968).
- 70- E.S. Fisher, M.H. Manghnani e R. Kikuta, J. Phys. Chem. Solids 34, 687 (1973).
- 71- R.L. Melcher, Phys. Rev. Letters 25, 1201 (1970).
- 72- R.L. Melcher, Phys. Rev. Letters 28, 165 (1972).
- 73- R. Truell, C. Elbaum e B.B. Chick, "Ultrasonics Methods in Solid State Physics", Academic Press (1969).
- 74- A.R. Edmonds, "Angular Momentum in Quantum Mechanics", Princeton (1960).